

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 09-216841

(43)Date of publication of application : 19.08.1997

(51)Int.Cl. C07C 25/24
C09K 19/18
C09K 19/30
C09K 19/42
G02F 1/13

(21)Application number : 08-047950

(71)Applicant : CHISSO CORP

(22)Date of filing : 08.02.1996

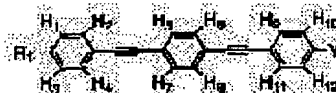
(72)Inventor : MIYAZAWA KAZUTOSHI
KOGA KOJI
MATSUI SHUICHI
HACHITANI NORIHISA
NAKAGAWA ETSUO

(54) ACETYLENE DERIVATIVE AND LIQUID CRYSTAL COMPOSITION AND LIQUID CRYSTAL DISPLAY ELEMENT CONTAINING THE DERIVATIVE

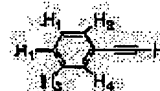
(57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To obtain a new compound having a large refractive index anisotropic value, excellent in compatibility with other liquid-crystalline compounds, having high chemical stability and suitable for liquid crystal elements.

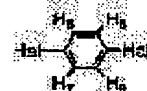
SOLUTION: A liquid crystalline acetylene derivative of formula I (H₁-H₁₂ are each independently H, F, etc.; R₁ is a 1-20C alkyl group; Y₁ is R₁, F, Cl, etc.), e.g. 4-(2-(3-fluoro-4-methylphenyl)ethynyl)-1-(2-(4-methylphenyl)ethynyl) benzene. The compound of formula I is obtained by reacting a phenylacetylene derivative of formula II with a halogen compound of formula III (Hal is Br, I) in the presence of a Pd catalyst in a basic amine solvent and again subjecting the reaction product to the same reaction in the presence of a Pd catalyst in a basic amine solvent. A liquid crystal composition comprises the compound of formula I as the first component and e.g. a compound of formula II [R₂ is a 1-10C alkyl, etc.; Y₂ is F, Cl, etc.; (a) is 1,2] as the second component.



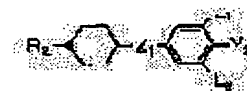
I



II



III



IV

LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's
decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's
decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2000 Japanese Patent Office

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平9-216841

(43) 公開日 平成9年(1997)8月19日

(51) Int.Cl. ⁸	識別記号	庁内整理番号	F I	技術表示箇所
C 0 7 C 25/24		7106-4H	C 0 7 C 25/24	
C 0 9 K 19/18			C 0 9 K 19/18	
			19/30	
			19/42	
G 0 2 F 1/13	5 0 0		G 0 2 F 1/13	5 0 0
審査請求 未請求 請求項の数17 F D (全 44 頁)				

(21) 出願番号 特願平8-47950

(22) 出願日 平成8年(1996)2月8日

(71) 出願人 000002071

チッソ株式会社

大阪府大阪市北区中之島3丁目6番32号

(72) 発明者 宮沢 和利

千葉県市原市ちはら台3-27-7

(72) 発明者 古賀 光二

千葉県市原市八幡海岸通1963-4

(72) 発明者 松井 秋一

千葉県市原市辰巳台東2丁目17番地

(72) 発明者 蜂谷 典久

千葉県市原市青葉台2丁目5番地

(72) 発明者 中川 悦男

千葉県市原市五井8890番地

(74) 代理人 弁理士 野中 克彦

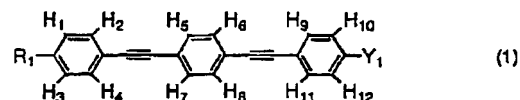
(54) 【発明の名称】 アセチレン誘導体および該誘導体を含む液晶組成物および液晶表示素子

(57) 【要約】

【課題】特に大きな屈折率異方性値と、他の液晶との相溶性に優れた新規な液晶性化合物、および液晶組成物。

【解決手段】 一般式(1)

【化1】

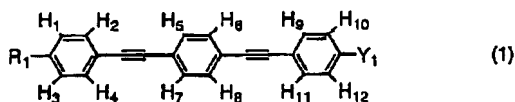


(式中、 H_1 、 H_2 、 H_3 、 H_4 、 H_5 、 H_6 、 H_7 、 H_8 、 H_9 、 H_{10} 、 H_{11} 及び H_{12} はそれぞれ独立にH、F又はClを示すが、 H_1 、 H_2 、 H_3 、 H_4 、 H_9 、 H_{10} 、 H_{11} 及び H_{12} の中、少なくとも一つはF又はClであり、 R_1 は C_{1-20} のアルキル基を示し、基中のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Si-$ 、 $-CH=CH-$ 又は $-C\equiv C-$ で置換されてもよく、更に基中の任意のH原子はハロゲン原子で置換されてもよく、 Y_1 は R_1 、F、Cl、Br、I原子又はシアノ基を示す)で表される液晶性化合物。

【特許請求の範囲】

【請求項1】 一般式(1)

【化1】



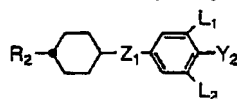
(式中、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂は、それぞれ独立に水素原子、フッ素原子または塩素原子を示し、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中の少なくとも一つはフッ素原子または塩素原子であり、R₁は炭素数1~20のアルキル基を示し、基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、-CH=CH-または-C≡C-で置換されていてもよく、基中の任意の水素原子はハロゲン原子で置換されていてもよく、Y₁はR₁、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子またはシアノ基をそれぞれ示す。)で表される液晶性アセチレン誘導体。

【請求項2】 請求項1において、R₁が炭素数1~20のアルキル基である液晶性アセチレン誘導体。

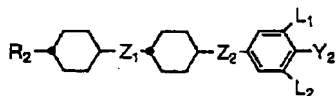
【請求項3】 請求項2において、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂がそれぞれ独立に水素原子またはフッ素原子である、液晶性アセチレン誘導体。

【請求項4】 請求項3において、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中のいずれか一つがフッ素原子であり、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中のいずれか一つがフッ素原子であり、残りが水素原子である、液晶性アセチレン誘導体。

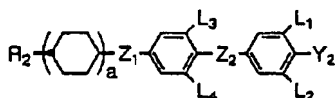
【請求項5】 請求項3において、H₁、H₂、H₃、



(2)



(3)



(4)

(式中、R₂は炭素数1~10のアルキル基を示し、Y₂はフッ素原子、塩素原子、OCF₃、OCHF₃、CF₃、CHF₃またはCH₂Fを示し、L₁、L₂、L₃およびL₄は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、Z₁およびZ₂は独立に-CH₂CH₂-、-CH=CH-または共有結合を示し、aは1または2を示す。)で表され

* H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中のいずれか二つがフッ素原子であり、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中のいずれか一つがフッ素原子であり、残りが水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項6】 請求項4において、H₁がフッ素原子であり、H₂~H₁₂が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項7】 請求項4において、H₂がフッ素原子であり、H₁、H₃~H₁₂およびH₁が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項8】 請求項5において、H₁およびH₂がフッ素原子であり、H₃~H₁₂が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項9】 請求項5において、H₁およびH₂がフッ素原子であり、H₃~H₄およびH₅~H₁₂が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項10】 請求項5において、H₁およびH₂がフッ素原子であり、H₃~H₄およびH₅~H₁₂が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項11】 請求項5において、H₁およびH₂がフッ素原子であり、H₃~H₄およびH₅~H₁₂が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項12】 請求項5において、H₁およびH₂がフッ素原子であり、H₃~H₄、H₅、およびH₆~H₁₂が水素原子である液晶性アセチレン誘導体。

【請求項13】 第一成分として請求項1~12のいずれか一項に記載の液晶性アセチレン誘導体を少なくとも一つ含有し、第二以下の成分として少なくとも一つの化合物を含有することを特徴とする液晶組成物。

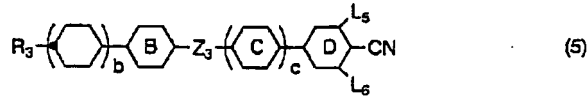
【請求項14】 請求項13において、第二成分として一般式(2)、(3)または(4)

【化2】

る化合物からなる群から選択される少なくとも一つの化合物を含有することを特徴とする液晶組成物。

【請求項15】 請求項13において、第二成分として、一般式(5)、(6)、(7)、(8)または(9)

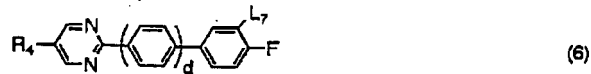
【化3】



(式中、 R_3 はフッ素原子、炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、該アルキル基またはアルケニル基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Bはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたは1, 3-ジオキサントランス-2, 5-ジイルを示し、六員環Cはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン*

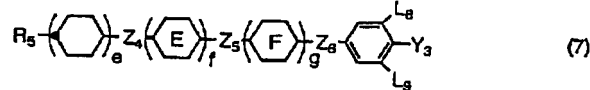
またはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Dはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_3 は $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ または共有結合を示し、 L_5 および L_6 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 b および c は独立に0または1を示す。)

【化4】



(式中、 R_4 は炭素数1~10のアルキル基を示し、 L_7 は水素原子またはフッ素原子を示し、 d は0または1を示す。)

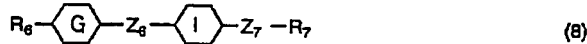
【化5】



(式中、 R_5 は炭素数1~10のアルキル基を示し、六員環Eおよび六員環Fは独立にトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_4 および Z_5 は独立に $-\text{COO}-$ または共有結合を示し、 Z_6 は $-\text{COO}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ を示し、 L_8 および L_9 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 Y_3 はフッ素原子、 OCF_3 、 OCHF_2 、 CF_3 、 CHF_2 または CH_3 *

★ F を示し、 e 、 f および g は独立に0または1を示す。ただし、 e 、 f および g が同時に0であることはなく、 e が0の時は Z_4 は共有結合であり、 f または g が0の時は Z_5 は共有結合であり、 f および g が0である時はさらに Z_6 も共有結合であることを条件とする。)

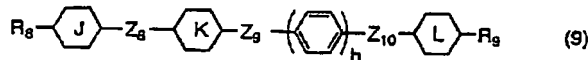
【化6】



(式中、 R_6 および R_7 は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Gはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示す。)

☆し、六員環Iはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_8 は $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{C}-$ または共有結合を示し、 Z_7 は $-\text{COO}-$ または共有結合を示す。)

【化7】



(式中、 R_8 および R_9 は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Jはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Kはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2, 5-ジイルまたは側位の一つ以上の水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい1, 4-フェニレンを示し、六員環Lはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_9 およ

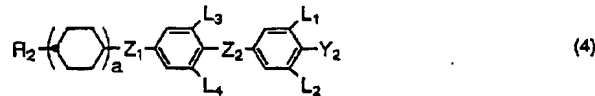
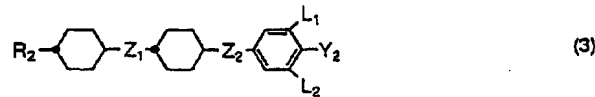
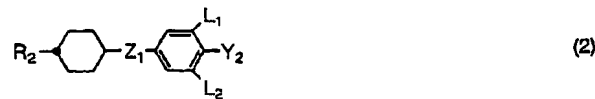
び Z_{10} は独立に $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ または共有結合を示し、 Z_9 は $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{COO}-$ または共有結合を示し、 h は0または1を示す。ただし、 h が0である時は Z_9 および Z_{10} の少なくとも一方は共有結合であることを条件とする。)、で表される化合物からなる群から選択される化合物を少なくとも一つ含有することを特徴とする液晶組成物。

【請求項16】 請求項13において、第二成分として、一般式(2)、(3)または(4)

【化8】

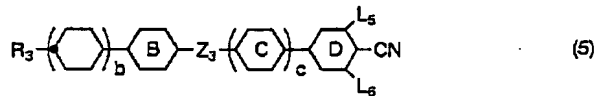
5

6



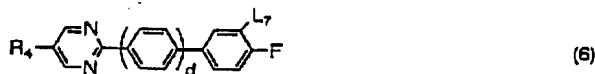
(式中、 R_2 は炭素数1~10のアルキル基を示し、 Y_2 はフッ素原子、塩素原子、 OCF_3 、 OCHF_2 、 CF_3 、 CHF_2 または CH_2F を示し、 L_1 、 L_2 、 L_3 および L_4 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 Z_1 および Z_2 は独立に $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ また *

*は共有結合を示し、 a は1または2を示す。)で表される化合物からなる群から選択される少なくとも一つの化合物を含有し、第三成分として、一般式(5)、(6)、(7)、(8)または(9) 【化9】

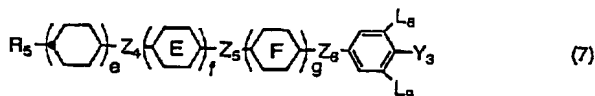


(式中、 R_3 はフッ素原子、炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、該アルキル基またはアルケニル基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Bはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたは1, 3-ジオキサントランス-2, 5-ジイルを示し、六員環Cはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン*

※ンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Dはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_3 は $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{COO}-$ または共有結合を示し、 L_5 および L_6 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 b および c は独立に0または1を示す。) 【化10】

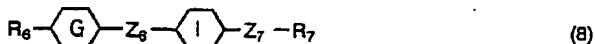


(式中、 R_4 は炭素数1~10のアルキル基を示し、 L_7 は水素原子またはフッ素原子を示し、 d は0または1を示す。★) 【化11】



(式中、 R_5 は炭素数1~10のアルキル基を示し、六員環Eおよび六員環Fは独立にトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_4 および Z_5 は独立に $-\text{COO}-$ または共有結合を示し、 Z_6 は $-\text{COO}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ を示し、 L_8 および L_9 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 Y_3 はフッ素原子、 OCF_3 、 OCHF_2 、 CF_3 、 CHF_2 または CH_2F を示し、 e 、 f および g は独立に0または1を示す。ただし、 e 、 f および g が同時に0であることはなく、 e が0の時は Z_4 は共有結合であり、 f または g が0の時は Z_5 は共有結合であり、 f および g が0である時はさらに Z_6 も共有結合であることを条件とする。) 【化12】

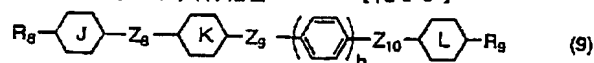
☆、Fを示し、 e 、 f および g は独立に0または1を示す。ただし、 e 、 f および g が同時に0であることはなく、 e が0の時は Z_4 は共有結合であり、 f または g が0の時は Z_5 は共有結合であり、 f および g が0である時はさらに Z_6 も共有結合であることを条件とする。) 【化12】



(式中、 R_6 および R_7 は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六

員環Gはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Iはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_6 は $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、-

COO-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-C≡C-また * を示す。)
 たは共有結合を示し、Z₇は-COO-または共有結合 * 【化13】



(式中、R₈およびR₉は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Jはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Kはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2, 5-ジイルまたは側位の二つ以上の水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい1, 4-フェニレンを示し、六員環Lはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₈およびZ₉は独立に-COO-、-CH₂CH₂-または共有結合を示し、Z₇は-CH=CH-、-C≡C-、-COO-または共有結合を示し、hは0または1を示す。ただし、hが0である時はZ₈およびZ₁₀の少なくとも一方は共有結合であることを条件とする。)で表される化合物からなる群から選択される化合物を少なくとも一つ含有することを特徴とする液晶組成物。

【請求項17】 請求項13~16のいずれか一項に記載の液晶組成物を用いて構成される液晶表示素子。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は液晶性化合物、該化合物を用いた液晶材料および液晶表示素子に関する。さらに詳しくは、本発明は、多くの液晶性化合物との相溶性に優れ、大きな屈折率異方性(以下Δn略記することがある)を有する液晶材料の成分として好適な新規な液晶性化合物に関し、さらに大きなΔnを有し他の液晶化合物との相溶性に優れた液晶材料、およびこれを使用する液晶表示素子に関する。

【0002】

【従来の技術】液晶表示素子は、時計、電卓、各種測定機器、自動車用の計器パネル、ワープロ、電子手帳、プリンター、コンピューター、テレビ等に用いられている。液晶表示素子は液晶性化合物が有する光学異方性および誘電率異方性(以下においてΔεと略記することがある)を利用するものであるが、その主たる表示方式としては、動的散乱型(DS型)、ゲスト・ホスト型(GH型)、ねじれネマチック型(TN型)、超ねじれネマチック型(STN型)、薄膜トランジスター型(TFT型)、表面安定化強誘電性液晶(SSFLC)等が知られている。また駆動方式にはスタティック駆動方式、時分割駆動方式、アクティブマトリックス駆動方式、2周波駆動方式等が知られている。

【0003】これらの中でも、表示品質が高く製造コストが低いという利点から、STN方式が、現在は最も多

く使用されている。このSTN方式に使用される液晶材料には種々の特性が要求されているが、通常は、(1)電気光学応答の時間が短い、(2)印加電圧対透過率特性における急峻性を持つ、(3)広い駆動温度範囲を持つ、(4)駆動電力が小さい、といった点が重要である。上記の特性を発現せしめるために、液晶材料の構成要素である液晶性化合物には次の特性が要求される。すなわち(1)大きな屈折率異方性値を有していること、(2)液晶組成物に添加した場合ネマチック相温度範囲の縮小をもたらさないこと、または低温度領域において結晶の析出等の相分離を生じにくいこと、(3)粘性が低いこと、(4)化学的に安定であること、(5)ベンド対スプレイ弾性定数比(K₃₃/K₁₁)が大きいこと、等が要求される。

【0004】更に詳しく述べる。液晶の粘性は、表示素子内で配向した液晶分子が印加された電場に対して応答する速度を支配する要素であることが、すでに知られている(Phys. Lett., 39A, 69(1972))。すなわち高速応答性を示す液晶組成物を調製するためには、非常に粘性の低い液晶性化合物を多量に使用し液晶組成物を構築するのが好ましい。低い粘性を有する液晶性化合物の探索は古くから精力的に行われてきた。この検討過程で単純な構造を持つ2環系化合物、すなわちピシクロヘキサン類、フェニルシクロヘキサン類が最も低い粘性を持つことが知られるに至った。しかしながらこれ以上単純な構造、換言すれば現在知られている化合物に比べてより低い粘性を持つ化合物を見いだすことは極めて困難である。この問題点を克服するもう一点の解決方法が液晶セルの厚み(以下においてdと略記することがある)を薄くすることである。すなわちセル厚を従来の液晶セルに比べ薄くすることで高速応答性を獲得しようというものである。しかしながら表示品位を考慮した場合、Appl. Phys. Lett. 38(7), 497に述べられたファーストミニマムの条件である、レターデーション(d・Δn)の適正値を逸脱してはならない。すなわち屈折率異方性値とセル厚の積を一定に保ちながらセル厚を薄くすることが必要になり、このために従来の化合物に比べ著しく大きな屈折率異方性値を有する液晶性化合物を成分として液晶材料のΔnを大きくすることが必要になった。印加電圧対透過率特性(以下V-T特性と略記することがある)における急峻性は、ベンド対スプレイ弾性定数比K₃₃/K₁₁に大きく起因している(Proc. of Japan Display, 388(1986))。報告によれば、大きな弾性定数比を持つ液晶がより急峻なV-T特性を有している。V-T特性の良好な液晶材料を用いること

により表示品位の高い液晶表示が達成できる。

【0005】また広い範囲の温度領域での使用を可能にするため、液晶組成物は特に低温でネマチック相を有することを要求される。低温度域で、結晶の析出やスメクチック相の発現のない液晶組成物が要求されていることは言うまでもない。液晶材料は個々の表示素子に要求される諸々の特性に適合すべく、通常は数種ないし二十数種の液晶性化合物を含む混合物で構成される。そのため、使用する液晶性化合物の、他の液晶性化合物に対する低温での相溶性の高いことが極めて重要である。さらに近年は液晶表示の消費電力を小さくすることが重要課題になっており、素子の駆動電圧の低下が必要になっている。駆動電圧の低下にはしきい値電圧（以下 V_{th} と略記することがある）を小さくすることが必要である。しきい値電圧は、誘電率異方性値の関数であり、Mol. Cryst. Liq. Cryst., 12, 57 (1970) に、

$$V_{th} = \pi (K / \epsilon_0 \Delta \epsilon)^{1/2}$$

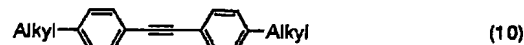
の関係が報告されている。ここに K は弾性定数であり、 ϵ_0 は真空中での誘電率である。これに従い、特に駆動電圧の低い液晶材料を必要とするときは誘電率異方性値の大きな液晶材料を使用することが必要になる。また、液晶表示素子はしばしば高温下で、例えば屋外といった過酷な条件下で使用されるので、液晶組成物に用いられる液晶性化合物は十分に高い化学的安定性を有していなければならない。また、種々の特性における重要な要素として温度依存性が小さいことも重要である。実用にされる液晶表示素子は、種々の環境下で、特に極めて広い温度範囲（一例として $-20 \sim 120^\circ\text{C}$ ）で、その表示品位を大きく変化させないように維持されなければならない。この要求を実現するためには諸々の特性値の温度依存性が極めて小さい液晶材料を使用する必要がある。

【0006】STN表示素子用の液晶材料は現在までに種々検討され、優れた化合物が数多く開発されている。特に大きな弾性定数比 K_{11}/K_{11} を持つ化合物としてはアルケニル化合物が開発され急峻な $V-T$ 特性を持つ液晶材料が実用化されている。しかし非常に大きな Δn を持つ液晶性化合物は、現在のところ、ほんの数例が知られ、実用化されているのみである。まず最初に実用化された高 Δn の化合物は、J. Maltheteらにより開示された式(10)のトラン化合物である(Mol. Cryst. Liq. Cryst., 23, 233 (1973))。このトラン化合物は比較的大きな Δn を持ち現在実用にされている。しかしその屈折率異方性値は約0.20と十分に満足できるほど大きなものではなかった。この問題を解決すべく、分極率の増加を目的に式(11)に示すアルキニル基を含むトラン誘導体が開発された(特開昭64-879号)。しかしその屈折率異方性値は増大したものの(>0.20)、この化合物は他の多くの液晶化合物との相溶性が著しく低く、その

上、化学的に不安定であるという実用上大きな制約を伴った。

【0007】

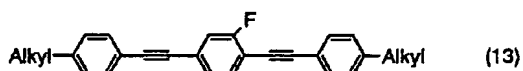
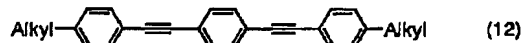
【化14】



【0008】さらに高温度領域でネマチック相を示す化合物を得ることを目的に式(12)の化合物が開発された(特開平2-83340号)。この化合物は大きな屈折率異方性値と高い透明点を示したが、やはり他の多くの液晶性化合物との相溶性が著しく悪く、実用には不都合であった。この問題を解決すべく開発されたのが式(13)の化合物である(EP581272A)。この化合物は、低温下の相溶性はある程度向上したが、未だ十分とは言えず、さらにフッ素原子を導入したことにより粘性が向上してしまうという欠点があった。

【0009】

【化15】



【0010】

【発明が解決しようとする課題】すなわち本発明の一つの目的は、開示されている従来の化合物に比べて、さらに大きな屈折率異方性値を有し、他の多くの液晶性化合物との相溶性が良好であり、かつ、高い化学的安定性を持つ、液晶性化合物を提供するにある。本発明の別の目的は、大きな Δn 、良好な相溶性に加えて、低い粘性、大きな $\Delta \epsilon$ と広いネマチックレンジを有する液晶組成物を提供することであり、また別の目的は、しきい値電圧の小さい実用的な液晶表示素子を提供することにある。

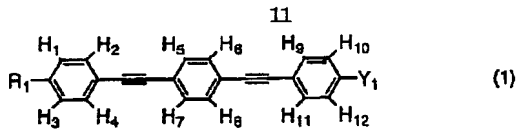
【0011】

【課題を解決するための手段】本発明者等は、ハロゲン原子で置換された1,4-フェニレン環を末端に持ちかつ、二つの1,2-エチニレン結合によって結合された3つの1,4-フェニレン環からなる三環型アセチレン誘導体が、特異的に大きな屈折率異方性値と、低温下における多くの液晶性化合物との高い相溶性を有することを見い出して、本発明を完成するに至った。すなわち、本発明の第一は、

(1) 一般式(1)

【0012】

【化16】



【0013】(式中、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_7, H_8, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} は、それぞれ独立に水素原子、フッ素原子または塩素原子を示し、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} の中の少なくとも一つはフッ素原子または塩素原子であり、 R_1 は炭素数1~20のアルキル基を示し、基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ で置換されていてもよく、基中の任意の水素原子はハロゲン原子で置換されていてもよく、 Y_1 は R_1 、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子またはシアノ基をそれぞれ示す。)で表される液晶性アセチレン誘導体、であり、その態様は以下の(2)~(5)項に示される。

(2) 前記の(1)項において、 R_1 が炭素数1~20のアルキル基である液晶性アセチレン誘導体。

(3) 前記の(2)項において、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_7, H_8, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} がそれぞれ独立に水素原子またはフッ素原子であり、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} の*

*少なくとも一つがフッ素原子である、液晶性アセチレン誘導体。

(4) 前記の(3)項において、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_7, H_8, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} の中のいずれか一つがフッ素原子であり、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} の少なくとも一つがフッ素原子であり、残りが水素原子である、液晶性アセチレン誘導体。

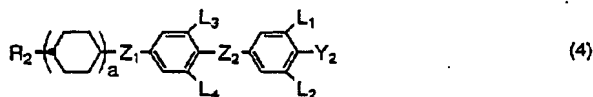
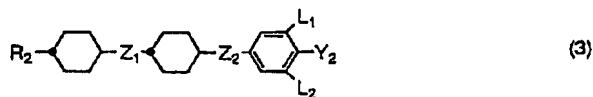
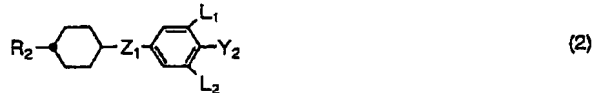
(5) 前記の(3)項において、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_7, H_8, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} の中のいずれか二つがフッ素原子であり、 $H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_9, H_{10}, H_{11}$ および H_{12} の少なくとも一つがフッ素原子であり、残りが水素原子である液晶性アセチレン誘導体。本発明の第二は、

(6) 第一成分として、前記の(1)~(5)項のいずれかに記載される液晶性アセチレン誘導体を少なくとも一つ含有し、第二以下の成分として少なくとも一つの化合物を含有することを特徴とする液晶組成物、であり、その態様は以下の(7)~(9)項に示される。

(7) 前項において、第二成分として一般式(2)、(3)または(4)

【0014】

【化17】



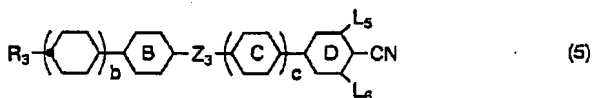
【0015】(式中、 R_2 は炭素数1~10のアルキル基を示し、 Y_2 はフッ素原子、塩素原子、 OCF_3 、 OCF_2 、 CF_3 、 CHF_2 または CH_2F を示し、 L_1, L_2, L_3 および L_4 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 Z_1 および Z_2 は独立に $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ または共有結合を示し、 a は1または2を示す。)で表される化合物からなる群から選択される少な*

くとも一つの化合物を含有することを特徴とする液晶組成物。

(8) 前記の(6)項において、第二成分として、一般式(5)、(6)、(7)、(8)または(9)

【0016】

【化18】

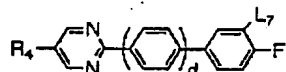


【0017】(式中、 R_3 はフッ素原子、炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、該アルキル基またはアルケニル基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子に

よって置換されていてもよく、六員環Bはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたは1, 3-ジオキサソートランス-2, 5-ジイルを示し、六員環Cはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、

13

1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Dはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₁は-CH₂CH₂-、-COO-または共有結合を示し、L₁およびL₂ *



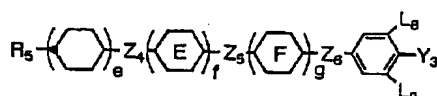
(6)

【0019】(式中、R₄は炭素数1~10のアルキル基を示し、L₇は水素原子またはフッ素原子を示し、dは0または1を示す。)

※【0020】

【化20】

※10



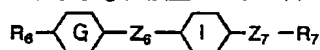
(7)

【0021】(式中、R₁は炭素数1~10のアルキル基を示し、六員環Eおよび六員環Fは独立にトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₁およびZ₂は独立に-COO-または共有結合を示し、Z₃は-COO-または-C≡C-を示し、L₁およびL₂は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、Y₃はフッ素原子、OCF₃、OCHF₂、CF₃、CHF₂またはCH₂Fを示し、e、fおよびgは独立に0または★

★は1を示す。ただし、e、fおよびgが同時に0であることはなく、eが0の時はZ₁は共有結合であり、fまたはgが0の時はZ₂は共有結合であり、fおよびgが0である時はさらにZ₃も共有結合であることを条件とする。)

20 【0022】

【化21】



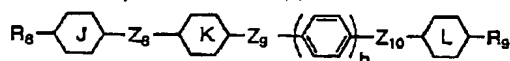
(8)

【0023】(式中、R₆およびR₇は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Gはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Iはトランス-1, 4-シクロヘ

☆キシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₄は-C≡C-、-COO-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-、C=C-または共有結合を示し、Z₅は-COO-または共有結合を示す。)

【0024】

【化22】



(9)

【0025】(式中、R₈およびR₉は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Jはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Kはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2, 5-ジイルまたは側位の一つ以上の水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい、1, 4-フェニレンを示し、六員環Lはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₆およびZ₁₀は独立に-COO-、-CH₂CH₂-

-または共有結合を示し、Z₉は-CH=CH-、-C≡C-、-COO-または共有結合を示し、hは0または1を示す。ただし、hが0である時はZ₇およびZ₁₁の少なくとも一方は共有結合であることを条件とする。)で表される化合物からなる群から選択される化合物を少なくとも一つ含有することを特徴とする液晶組成物。

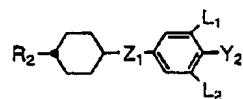
(9) 前記の(6)項において、第二成分として、一般式(2)、(3)または(4)

【0026】

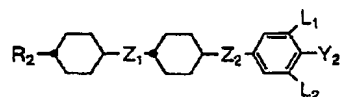
【化23】

15

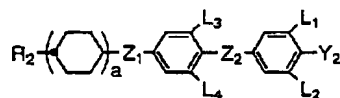
16



(2)



(3)



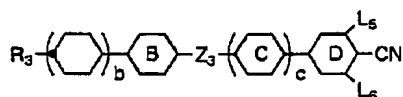
(4)

【0027】(式中、R₂は炭素数1～10のアルキル基を示し、Y₂はフッ素原子、塩素原子、OCF₃、OC HF₂、CF₃、CHF₂またはCH₂Fを示し、L₁、L₂、L₃およびL₄は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、Z₁およびZ₂は独立に-CH₂CH₂-, -CH =CH-または共有結合を示し、aは1または2を示す

*)で表される化合物からなる群から選択される少なくとも一つの化合物を含有し、第三成分として、一般式(5)、(6)、(7)、(8)または(9)

【0028】

【化24】



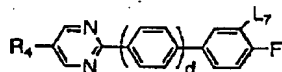
(5)

【0029】(式中、R₃はフッ素原子、炭素数1～10のアルキル基または炭素数2～10のアルケニル基を示し、該アルキル基またはアルケニル基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Bはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたは1, 3-ジオキサントランス-2, 5-ジイルを示し、六員環Cはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、※

※1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Dはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₃は-CH₂CH₂-, -COO-または共有結合を示し、L₅およびL₆は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、bおよびcは独立に0または1を示す。)

【0030】

【化25】

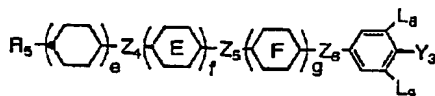


(6)

【0031】(式中、R₄は炭素数1～10のアルキル基を示し、L₇は水素原子またはフッ素原子を示し、dは0または1を示す。)

★【0032】

【化26】



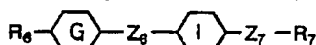
(7)

【0033】(式中、R₅は炭素数1～10のアルキル基を示し、六員環Eおよび六員環Fは独立にトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₇およびZ₈は独立に-COO-または共有結合を示し、Z₉は-COO-または-C≡C-を示し、L₈およびL₉は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、Y₃はフッ素原子、OCF₃、OCHF₂、CF₃、CHF₂またはCH₂Fを示し、e、fおよびgは独立に0または

40※は1を示す。ただし、e、fおよびgが同時に0であることはなく、eが0の時はZ₇は共有結合であり、fまたはgが0の時はZ₈は共有結合であり、fおよびgが0である時はさらにZ₉も共有結合であることを条件とする。)

【0034】

【化27】

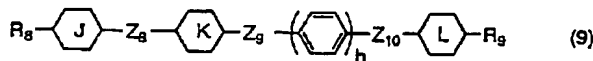


(8)

【0035】(式中、R₆およびR₇は独立に炭素数1～10のアルキル基または炭素数2～10のアルケニル基

17

を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Gはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Iはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₈は-C *



【0037】(式中、R₈およびR₉は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、六員環Jはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Kはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2, 5-ジイルまたは側位の一つ以上の水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい1, 4-フェニレンを示し、六員環Lはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、Z₈およびZ₉は独立に-COO-、-CH₂CH₂-または共有結合を示し、Z₁₀は-C≡C-、-C≡C-または共有結合を示し、hは0または1を示す。ただし、hが0である時はZ₈およびZ₉の少なくとも一方は共有結合であることを条件とする。)で表される化合物からなる群から選択される化合物を少なくとも一つ含有することを特徴とする液晶組成物。本発明の第三は、

(10) 前記の(6)~(9)項のいずれか一項に記載の液晶組成物を用いて構成される液晶表示素子、である。

【0038】本発明の化合物を示す一般式(1)において、R₁は1~20個の炭素からなるアルキル基を示すが、基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、-CH=CH-、-C≡C-で置換されていてもよく、さらに基中の任意の水素原子はハロゲン原子で置換されてもよい。R₁の好ましい具体的な置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルコシアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルケニルオキシ基、アルキニルオキシ基、ハロゲン置換アルキル基、ハロゲン置換アルコキシ基、ハロゲン置換アルコシアルキル基、ハロゲン置換アルケニル基、ハロゲン置換アルキニル基、チオアルキル基、ジメチルシリル基またはアルキルシリル基が示される。R₁としてはより具体的には、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、ヘプチルオキシ基、オクチルオキシ基、メトキシメチル基、エトキシメチル基、プロポキシメチル

18

*≡C-、-COO-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-C≡C-または共有結合を示し、Z₇は-COO-または共有結合を示す。)

【0036】

【化28】

基、ブトキシメチル基、メトキシエチル基、エトキシエチル基、プロポキシエチル基、メトキシプロピル基、エトキシプロピル基、プロポキシプロピル基、ビニル基、1-プロペニル基、1-ブテニル基、1-ペンテニル基、3-ブテニル基、3-ペンテニル基、アリルオキシ基、エチニル基、1-プロピニル基、1-ブチニル基、1-ペンチニル基、3-ブチニル基、3-ペンチニル基、2-フルオロエチル基、3-フルオロプロピル基、4-フルオロブチル基、5-フルオロペンチル基、3-クロロプロピル基、2-フルオロエチニル基、2, 2-ジフルオロエチニル基、1, 2, 2-トリフルオロエチニル基、3-フルオロ-1-ブテニル基、4-フルオロ-1-ブテニル基、および3, 3, 3-トリフルオロ-1-プロピニル基、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ペンチルチオ基、エチルジヒドロシリル基、プロピルジヒドロシリル基、ペンチルジヒドロシリル基、エチルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、ペンチルジメチルシリル基、アリルジヒドロシリル基、アリルジメチルシリル基が好ましい置換基として挙げられる。

【0039】一般式(1)において、ベンゼン環上の置換基H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₀、H₁₁およびH₁₂はそれぞれ独立に水素原子、フッ素原子または塩素原子を示すが、本発明の化合物は、これらの置換基の中、構造骨格の外側のベンゼン環上の置換基H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中の少なくとも一つがフッ素原子または塩素原子であることを特徴とする。また、本発明において、骨格構造上外側のベンゼン環にある置換基H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中の少なくとも一つがフッ素原子である化合物がより好ましい。これらの外側のベンゼン環上の置換基H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₁₀、H₁₁およびH₁₂の中、少なくとも一つはフッ素原子または塩素原子であるが、これらの置換基の1~4個がフッ素または塩素のハロゲン原子で置換されている化合物が好ましく、また、外側のベンゼン環上のこれらの置換基の中一つまたは二つがこれらのハロゲン原子で置換された式(1)の化合物が、粘度を考慮するとより好ましい。本発明の化合物を示す一般式(1)において、Y₁は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、シアノ基、ハロゲン置換アルキル基、ハロゲン置換アルコキシ基、ハロゲン置換アルコシアルキル基、

ハロゲン置換アルケニル基、または前記した R_1 を示すが、化合物の低粘性を考慮すると、 Y_1 がフッ素原子、塩素原子、シアノ基または前述した R_1 である化合物が好ましい。

【0040】式(1)において、 R_1 および Y_1 の両者がハロゲン置換されていないアルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)である化合物は、その $\Delta\epsilon$ が負であるかまたは非常に小さい正である化合物である。式(1)において、 R_1 がハロゲン置換されていないアルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)であり、 Y_1 がフッ素原子、塩素原子、シアノ基または末端のメチル基のHの少なくとも一つがフッ素原子もしくは塩素原子で置換されたアルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)である化合物は、特に大きな正の $\Delta\epsilon$ を有する。より具体的な置換基 Y_1 としては、トリフルオロメチル基、ジフルオロメチル基、ジフルオロクロロメチル基、2, 2, 2-トリフルオロエチル基、トリフルオロメトキシ基、ジフルオロメトキシ基、ジフルオロクロロメトキシ基、ペンタフルオロエトキシ基、1, 1, 2, 2-テトラフルオロエトキシ基、ヘプタフルオロプロポキシ基、1, 1, 2, 3, 3, 3-ヘキサフルオロプロポキシ基、トリフルオロメトキシメチル基等が好ましい。式(1)において、 R_1 がハロゲン置換アルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)であり、 Y_1 がフッ素原子、塩素原子、シアノ基または末端のメチル基のHの少なくとも一つがフッ素原子もしくは塩素原子で置換されたアルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)である化合物には、正の $\Delta\epsilon$ を有する物が多い。この型の式(1)の化合物の誘電率異方性は、 R_1 および Y_1 の結合するベンゼン環上のH原子のFもしくはC1による置換の状況に影響される。式(1)において、 R_1 がハロゲン置換アルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)であり、 Y_1 が末端にハロゲン置換されていないメチル基を有するアルキル基(基中の一つまたは相隣接しない二

つ以上のメチレン基は酸素原子、硫黄原子、ジヒドロキシシリレン、ジメチルシリレン、 $-CH=CH-$ または $-C\equiv C-$ により置換されてもよい)である化合物には、正の $\Delta\epsilon$ を有する物が多い。この型の式(1)の化合物の誘電率異方性は、 R_1 および Y_1 の結合するベンゼン環上のHのFもしくはC1による置換の状況に影響される。

【0041】本発明の式(1)の液晶性アセチレン誘導体は、極めて大きな屈折率異方性値、低い粘性、高い化学的安定性、および他の液晶化合物に対する良好な相溶性を持ち、液晶組成物の構成要素として極めて有用である。特にこのアセチレン誘導体は、従来から知られている液晶性化合物に比較して著しく大きい屈折率異方性値を有している。後記する実施例でも示すように Δn は外挿値ではあるが0.457という驚くべき大きな値を示した。この値は現在知られている液晶性化合物の中で最も大きな値である。また、従来知られている多くの液晶性化合物に比較して、 Δn の温度依存性、特に低温領域での温度依存性が、極めて小さいという特徴がある。屈折率異方性についてのこれらの特性は、本発明の正の $\Delta\epsilon$ 値を有するアセチレン誘導体についてもまた負の $\Delta\epsilon$ 値を有するアセチレン誘導体についても、同様に示される。

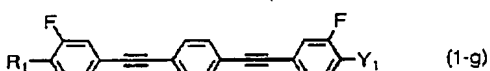
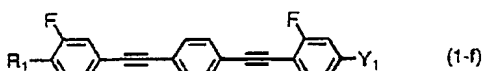
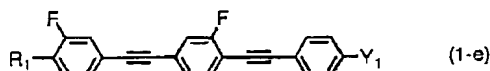
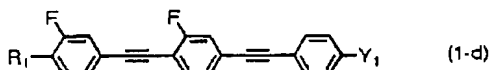
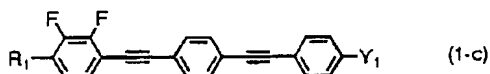
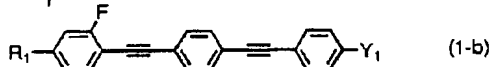
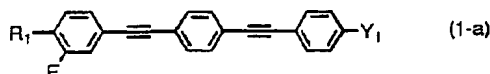
【0042】本発明の液晶性アセチレン誘導体は低い粘性を示し、これを液晶組成物に多量に混合しても、得られる液晶組成物全体の粘度を著しく増加することはない。また、該アセチレン誘導体は、粘度の温度依存性、特に低温域でのその温度依存性が極めて小さいという特徴を有する。本発明のアセチレン誘導体は、他の液晶性化合物あるいは液晶組成物に対する溶解度が高く、式(1)のアセチレン誘導体を用いることによってネマチック相が損なわれることはない。該誘導体を混合した液晶組成物は、 -20°C のような低温においてもネマチック相を示す。本発明のアセチレン誘導体は化学的に非常に安定で、これを混合した液晶組成物の比抵抗値は非常に高い。また、該誘導体は紫外線や熱といった外的要因に対する安定性が著しく高く、実用的な液晶組成物の成分として用いるに十分な化学的安定性を示す。本発明の化合物は先に述べた通り優れた特性を有するので、STN用の液晶材料としてはもちろんのこと、他の用途にも好適に使用できる。例えばTN用液晶化合物、ゲストホストモード用の液晶化合物、ポリマー分散型液晶表示素子用の液晶化合物、動的散乱モード用の液晶化合物、アクティブマトリックス用の液晶化合物、FLC用の液晶化合物としても好適に使用できる。本発明の化合物はいずれも前述したように優れた特性を有するが、特に好ましい化合物としては低粘性でかつ Δn が大であるという点から、分子中に一つまたは二つのフッ素原子または塩素原子を有する物を挙げることができる。すなわち、 Δn が大で $\Delta\epsilon$ が大きな正值である特に好ましい化合物と

21

しては、式(1)において、 R_1 が炭素数1~10の直鎖アルキル基であり、 $H_1 \sim H_{11}$ が水素原子であり、 H_{12} がフッ素原子であり、 Y_1 が水素原子または塩素原子であるアセチレン誘導体および該式において、 R_1 が炭素数1~10の直鎖アルキル基であり、 $H_1 \sim H_9$ および H_{11} が水素原子であり、 H_{10} および H_{12} がフッ素原子であり、 Y_1 が水素原子または塩素原子であるアセチレン誘導体を挙げることができる。また、 Δn が大で $\Delta \varepsilon$ が負であるかもしくは小さな正值である特に好ましい化合物としては、以下の各式で示される化合物が挙げられる。

【0043】

【化29】



【0044】これらの式において、 R_1 および Y_1 は独立に炭素数1~10の直鎖アルキル基を、より好ましくは炭素数1~5の直鎖アルキルを表す。本発明のアセチレン誘導体として以下の化合物を例示することができる。

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

C-I点: 160, 1°C, N-I点: 210, 0°C

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ペンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

22

ニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルオキシフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-シアノフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3,4-ジフルオロフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-トリフルオロメトキシフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ペンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エトキシフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ペンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-トリフルオロメトキシフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ペンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0045】4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

ル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(4-ヘブチルフェニル)エチ
ニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0046】4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メトキシメチルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メトキシメチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-クロロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エ

4-(2-(2-フルオロ-4-トリフルオロメトキシフェニル)エチル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-メチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチ
ニル)ベンゼン

10 4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)
ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチ
20ニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)
ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0048】4-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

40 3-フルオロ-4-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ベンゼン

4-(2-(2-クロロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)

10

20

30

40

50

エチニル) - 1 - (2 - (4 - プロピルフェニル)
エチニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ベンチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ブチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ベンチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ベンチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ベンチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ヘキシルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ベンチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ヘブチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - メチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - エチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - プロピルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ブチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ベンチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ヘキシルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ヘブチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - メチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - エチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - プロピルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン
4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エ
チニル) - 1 - (2 - (4 - ブチルフェニル) エチ
ニル) ベンゼン

【0050】 4 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘブチル
フェニル) エチニル) - 1 - (2 - (4 - ベンチルフェ
ニル) エチニル) ベンゼン

チニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン
【0051】4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メトキシメチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-クロロフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-フルオロフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-トリフルオロメチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブロビルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3,5,6-テトラフルオロ-4-ブロビルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブロビルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ブロビルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロボキシフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン
4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ブロビルフェニル)

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

10 4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘキシルフエニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフエニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ベンゼン

【0053】4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘ
ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチル
フェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチル)ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

40 3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メトキシメチルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチル
50 フェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブロビルフェ

ルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (4 - メチルフェ
ニル) エチニル) ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ベンゼン

2, 3-ジフルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-
 プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロ
 ピルフェニル)エチル)ベンゼン

3, 5-ジフルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-
 ブロビルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ブロ
 ビルフェニル)エチル)ベンゼン

2, 3-ジフルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-
 プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロ
 ピルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-トリフルオロメトキシフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニ
ル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチル)ベンゼン

【0055】3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチル)ベンゼン

ベンチルフェニル) エチニル) ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシ
ルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフ
ェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシ
ルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフ
ェニル)エチニル)ベンゼン

【0056】3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘブチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘブチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

3-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチル
30 フェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

C-N点: 156.4°C、N-I点: 187.1°C

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチル)ベンゼン

ル) エチニル) ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-エチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェ
ニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチル
フェニル)エチル)-1-(2-(4-ベンチルフェ
ニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-エチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニ
ル)エチニル)ベンゼン 10

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-エチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェ
ニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘブチルフェ
ニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-エチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェ
ニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0057】2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ
-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-
ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2, 3-ジフルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-
プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチ
ルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0058】2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ
-4-ベンチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-
-ベンチルフェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ブチルフェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2, 6-ジフルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-
プロピルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ベン
チルフェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピ
ルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ヘキシルフ
ェニル)エチル)ベンゼン

ニル) エチニル) - 1 - (2 - (4 - エチルフェニル) エチニル) ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブロ
ルフェニル)エチル)-1-(2-(4-ヘブチル
フェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

ニルフェニル)エチニル) - 1 - (2 - (4 - プチルフェニル)エチニル)ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-ブチル
フェニル)エチニル)-1-(2-(4-エチルフェニル)エチニル)-5

2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100 101 102 103 104 105 106 107 108 109 110 111 112 113 114 115 116 117 118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129 130 131 132 133 134 135 136 137 138 139 140 141 142 143 144 145 146 147 148 149 150 151 152 153 154 155 156 157 158 159 160 161 162 163 164 165 166 167 168 169 170 171 172 173 174 175 176 177 178 179 180 181 182 183 184 185 186 187 188 189 190 191 192 193 194 195 196 197 198 199 200 201 202 203 204 205 206 207 208 209 210 211 212 213 214 215 216 217 218 219 220 221 222 223 224 225 226 227 228 229 230 231 232 233 234 235 236 237 238 239 240 241 242 243 244 245 246 247 248 249 250 251 252 253 254 255 256 257 258 259 260 261 262 263 264 265 266 267 268 269 270 271 272 273 274 275 276 277 278 279 280 281 282 283 284 285 286 287 288 289 290 291 292 293 294 295 296 297 298 299 300 301 302 303 304 305 306 307 308 309 310 311 312 313 314 315 316 317 318 319 320 321 322 323 324 325 326 327 328 329 330 331 332 333 334 335 336 337 338 339 340 341 342 343 344 345 346 347 348 349 350 351 352 353 354 355 356 357 358 359 360 361 362 363 364 365 366 367 368 369 370 371 372 373 374 375 376 377 378 379 380 381 382 383 384 385 386 387 388 389 390 391 392 393 394 395 396 397 398 399 400 401 402 403 404 405 406 407 408 409 410 411 412 413 414 415 416 417 418 419 420 421 422 423 424 425 426 427 428 429 430 431 432 433 434 435 436 437 438 439 440 441 442 443 444 445 446 447 448 449 450 451 452 453 454 455 456 457 458 459 460 461 462 463 464 465 466 467 468 469 470 471 472 473 474 475 476 477 478 479 480 481 482 483 484 485 486 487 488 489 490 491 492 493 494 495 496 497 498 499 500 501 502 503 504 505 506 507 508 509 510 511 512 513 514 515 516 517 518 519 520 521 522 523 524 525 526 527 528 529 530 531 532 533 534 535 536 537 538 539 540 541 542 543 544 545 546 547 548 549 550 551 552 553 554 555 556 557 558 559 560 561 562 563 564 565 566 567 568 569 570 571 572 573 574 575 576 577 578 579 580 581 582 583 584 585 586 587 588 589 590 591 592 593 594 595 596 597 598 599 600 601 602 603 604 605 606 607 608 609 610 611 612 613 614 615 616 617 618 619 620 621 622 623 624 625 626 627 628 629 630 631 632 633 634 635 636 637 638 639 640 641 642 643 644 645 646 647 648 649 650 651 652 653 654 655 656 657 658 659 660 661 662 663 664 665 666 667 668 669 670 671 672 673 674 675 676 677 678 679 680 681 682 683 684 685 686 687 688 689 690 691 692 693 694 695 696 697 698 699 700 701 702 703 704 705 706 707 708 709 710 711 712 713 714 715 716 717 718 719 720 721 722 723 724 725 726 727 728 729 730 731 732 733 734 735 736 737 738 739 740 741 742 743 744 745 746 747 748 749 750 751 752 753 754 755 756 757 758 759 760 761 762 763 764 765 766 767 768 769 770 771 772 773 774 775 776 777 778 779 780 781 782 783 784 785 786 787 788 789 790 791 792 793 794 795 796 797 798 799 800 801 802 803 804 805 806 807 808 809 810 811 812 813 814 815 816 817 818 819 820 821 822 823 824 825 826 827 828 829 830 831 832 833 834 835 836 837 838 839 840 841 842 843 844 845 846 847 848 849 850 851 852 853 854 855 856 857 858 859 860 861 862 863 864 865 866 867 868 869 870 871 872 873 874 875 876 877 878 879 880 881 882 883 884 885 886 887 888 889 890 891 892 893 894 895 896 897 898 899 900 901 902 903 904 905 906 907 908 909 910 911 912 913 914 915 916 917 918 919 920 921 922 923 924 925 926 927 928 929 930 931 932 933 934 935 936 937 938 939 940 941 942 943 944 945 946 947 948 949 950 951 952 953 954 955 956 957 958 959 960 961 962 963 964 965 966 967 968 969 970 971 972 973 974 975 976 977 978 979 980 981 982 983 984 985 986 987 988 989 990 991 992 993 994 995 996 997 998 999 1000 1001 1002 1003 1004 1005 1006 1007 1008 1009 1010 1011 1012 1013 1014 1015 1016 1017 1018 1019 1020 1021 1022 1023 1024 1025 1026 1027 1028 1029 1030 1031 1032 1033 1034 1035 1036 1037 1038 1039 1040 104

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-メチルフェニ
ル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

10 4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチ
20 ニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘプチルフェ
ニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

40 4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-メチルフェニ
ル)エチル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-エチルフェニ
ル)エチル)ベンゼン

【0060】4-(2-(3-フルオロ-4-ブチル
50 エニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-

チニル) - 1 - (2 - (2 - フルオロ - 4 - ヘキシルフ
ェニル) エチニル) ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0061】4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチル
10 フェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4
-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

20 エニル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル) エ
チニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘキシルフ

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)-1-(2-(2-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

30 ル) エチニル) ベンゼン
4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - メチルフェニル) エチ
ニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - エチルフェニ

ル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ブロビルフェ

ニル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニ

ル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェ

ニル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェ

ニル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチ
ニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェ

ニル) エチニル) ベンゼン
4-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル) エチ
ニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニ

50 ル) エチニル) ベンゼン

ニル) エチニル) ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチル)-1-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチル)-1-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

【0063】4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ヘプチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-エチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-ヘキシルフェニル)エチニル)-1-(2-(3-フルオロ-4-ブチルフェニル)エチニル)ベンゼン

ニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - プロピルフェ 50

45

チニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ベンチルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - メチルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - エチルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - プロピルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ブチルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ペンチルフェニル) エチニル) ベンゼン

4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘキシルフェニル) エチニル) ベンゼン

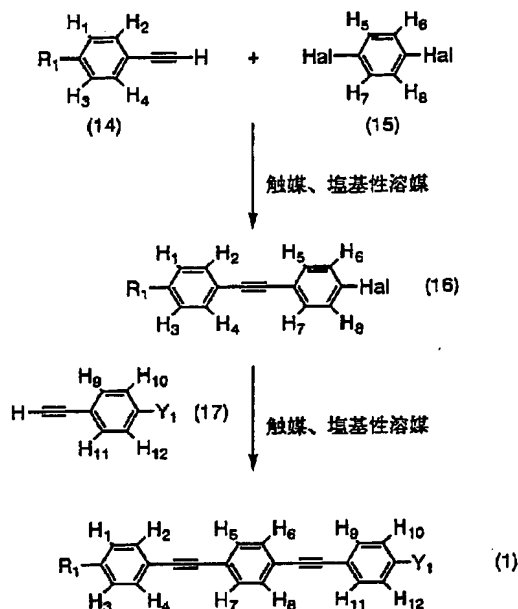
4 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) - 1 - (2 - (3 - フルオロ - 4 - ヘブチルフェニル) エチニル) ベンゼン

【0064】本発明の式(1)のアセチレン誘導体は通常の有機合成化学の手法を駆使することで容易に製造できる。例えば、オーガニック・シンセシス(John Wiley and Sons Inc. 発行)、オーガニック・リアクションズ(John Wiley and Sons Inc. 発行)、あるいは実験化学講座(丸善発行)等に記載の手法を適切に組み合わせることによって容易に合成できる。通常の有機合成化学的手法で、容易に式(1)の化合物を製造できるが、例えば次に示した代表例に従えば該化合物は問題なく製造できる。ただし、下記において R_1 、 Y_1 、 H_1 、 H_2 、 H_3 、 H_4 、 H_5 、 H_6 、 H_7 、 H_8 、 H_9 、 H_{10} 、 H_{11} および H_{12} は前記と同一の意味を持ち、 Hal は臭素原子あるいはヨウ素原子を示す。

【0065】

【化30】

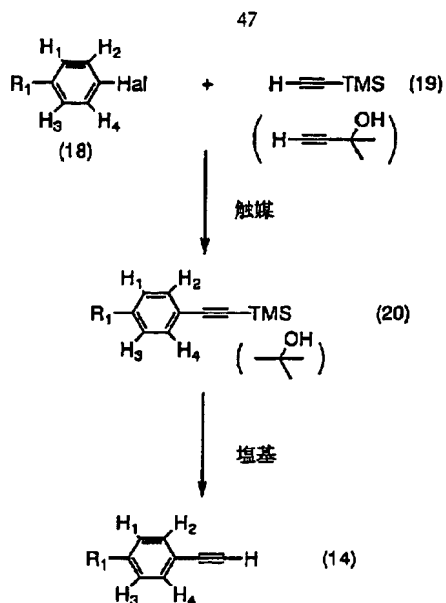
46



20 【0066】すなわちアルキン生成反応を2度繰り返すことで式(1)のアセチレン誘導体を製造できる。この場合最も実施容易なカストロ反応(J. Org. Chem., 28, 2163 (1963))を使用して何等問題ない。さらに R_1 と Y_1 が同一であるときには二段階の反応を行う必要はなく、一段階で式(1)のアセチレン誘導体を製造することができる。すなわちフェニルアセチレン誘導体(14)にハロゲン化物(15)を塩基性条件下、触媒の存在下で作用させてトランス誘導体(16)を製造できる。溶媒としてはジエチルアミン、ジエチルアニリン、トリエチルアミンといった汎用のアミン系化合物を反応溶媒に使用することで解決できる。触媒としてはPd系、またはNi系の化合物が好適に使用できる。1, 4位の二つのハロゲン原子が異なる式(15)の化合物を使用する方が第一段階の操作が簡便である。すなわち4-ヨード-1-ブロモベンゼン誘導体を用いた場合、第一段目の反応はヨウ素原子上で選択的に進行し、次段の反応に際して除去しなければならない3環化合物の生成を抑制することができる。上記の方法で製造したトランス誘導体(16)に前述と同一な条件で式(17)の化合物を作用させることにより目的とする式(1)のアセチレン誘導体を製造することができる。前述の反応で使用したフェニルアセチレン誘導体(14)または(17)は次の方法で容易に製造することができる。

【0067】

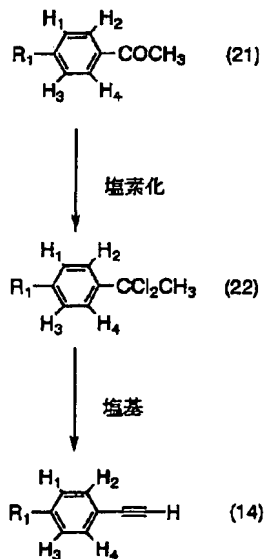
【化31】



【0068】すなわちハロゲン化物(18)に、片末端をトリメチルシリル基(TMS)等の保護基で保護したアセチレン誘導体(19)を作用させて付加体(20)としたのち、保護基を除去して式(14)または(17)のフェニルアセチレン誘導体を製造することができる。片末端を保護したアセチレン誘導体(19)としてはトリメチルシリルアセチレンあるいは3-メチル-3-ヒドロキシ-1-ブチン等が好適に使用できる。また、式(14)のフェニルアセチレンはアセトフェノン誘導体(21)から製造することもできる。

【0069】

【化32】



30

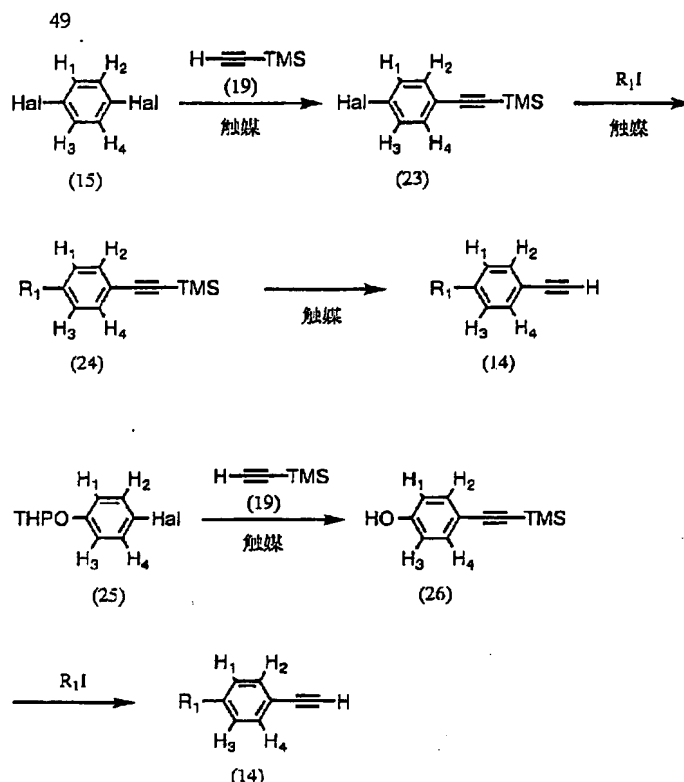
40

48

【0070】すなわち式(21)のアセトフェノン誘導体のカルボニル基を塩素化して、式(22)の1,1-ジクロロエタン誘導体とした後、強塩基の存在下脱塩化水素反応を行うことによってもフェニルアセチレン誘導体(14)を製造することができる。式(14)および式(17)においてR₁またはY₁がアルキル基、アルコキシ基、アルコシアルキル基、ハロゲン置換アルキル基、ハロゲン化アルコキシ基、ハロゲン置換アルコシアルキル基、チオアルキル基、アルキルジメチルシリル基、またはアルキルジヒドロキシシリル基である物は、対応する置換ベンゼンの4-位を常法によってヨウ素化または臭素化することで製造できるが、式(14)および式(17)においてR₁またはY₁がアルケニル基、アルキニル基、アルケニルオキシ基、アルキニルオキシ基、ハロゲン置換アルケニル基、またはハロゲン置換アルキニル基である化合物は、次のように製造するのが好適である。

【0071】

【化33】

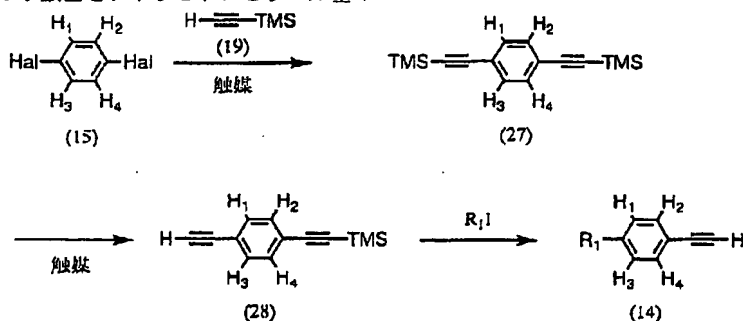


【0072】すなわち、 R_1 または Y_1 がアルケニル基、またはハロゲン置換アルケニル基である場合は、ジハロゲノ化合物(15)に化合物(19)を前述の方法に従って作用させ、化合物(23)とし、これに、 R_1I のグリニャール試薬またはリチウム化合物を作用させてクロスカップリング反応を行なって化合物(24)とし、保護基を離脱させることで化合物(14)が得られる。 R_1I の代わりに Y_1I を使用することで、化合物(17)が製造される。また、 R_1 または Y_1 がアルケニルオキシ基またはアルキニルオキシ基である場合には、4-ハロゲノフェノールの水酸基をテトラヒドロピラニル基*

＊(THP基)で保護した化合物(25)に前述した方法でアルキニル部位を導入した後酸性条件下でTHP基を離脱して化合物(26)とし、これにアルケニルハライドまたはアルキニルハライドを作用させた後、TMSを離脱して化合物(14)を得る。同様の方法により、化合物(17)も製造することができる。また、 R_1 または Y_1 がアルケニル基またはハロゲン置換アルケニル基である場合には、次のようにして製造できる。

【0073】

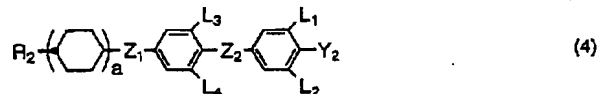
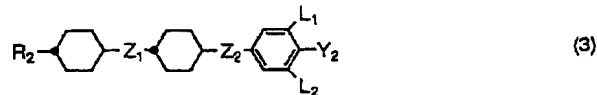
【化34】



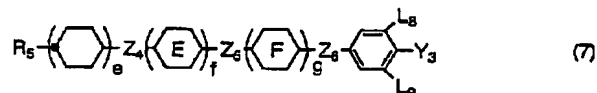
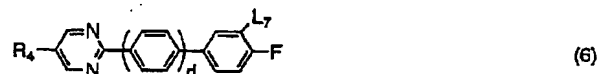
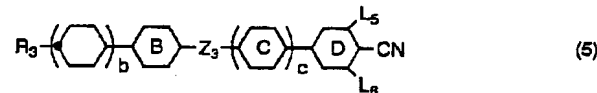
【0074】すなわち、化合物(15)にトリメチルシリルアセチレンを作用させ化合物(27)とした後、一方のTMS基を選択的に除去して、化合物(28)とする。これに常法に従いアルキルハライド、またはハロゲン置換アルキルハライドを塩基性条件下に作用させ、ついで保護基のTMS基を離脱させて化合物(14)を得

る。化合物(17)も同様の方法で製造できる。本発明で提供される液晶組成物は、第一成分として式(1)で表されるアセチレン誘導体を少なくとも一つ含有し、第二以下の液晶性成分を含有する液晶組成物である。本発明の液晶組成物は、式(1)のアセチレン誘導体を成分とすることにより、その Δn を向上させているところに

特徴を有す。すなわち、本発明の組成物はその使用目的 * とにより完成する。
 に応じて、第二以下の成分として一般式(2)~(9) 【0075】
 で表される化合物群から選択される化合物を混合するこ * 【化35】



【0076】式中、 R_2 は炭素数1~10のアルキル基 * 示し、 Y_2 はフッ素原子、塩素原子、 OCF_3 、 OCH H-または共有結合を示し、 a は1または2を示す。
 F_2 、 CF_3 、 CHF_2 または CH_2F を示し、 L_1 、 L_2 、 【0077】
 L_3 および L_4 は独立に水素原子またはフッ素原子を示 * 【化36】

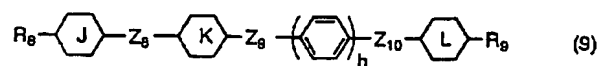
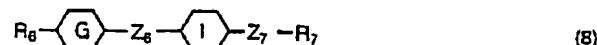


【0078】これらの式において、 R_3 はフッ素原子、炭素数1~10のアルキル基または炭素数2~10のアルケニル基を示し、該アルキル基またはアルケニル基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素原子によって置換されていてもよく、 R_4 および R_5 は炭素数1~10のアルキル基を示し、六員環Bはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたは1, 3-ジオキサソートランス-2, 5-ジイルを示し、六員環Cはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環D、六員環Eおよび六員環Fは独立にトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、 Z_3 は $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CO}-$ ★

30★O-または共有結合を示し、 Z_4 および Z_5 は独立に $-\text{C}$ O O-または共有結合を示し、 Z_6 は $-\text{COO}-$ または $-\text{C}\equiv\text{C}-$ を示し、 Y_3 はフッ素原子、 OCF_3 、 OCH F_2 、 CF_3 、 CHF_2 または CH_2F を示し、 L_1 、 L_2 、 L_7 、 L_8 および L_9 は独立に水素原子またはフッ素原子を示し、 b 、 c 、 d 、 e 、 f および g は独立に0または1を示す。ただし、 e 、 f および g が同時に0であることはなく、 e が0の時は Z_4 は共有結合であり、 f または g が0の時は Z_5 は共有結合であり、 f および g が0である時はさらに Z_6 も共有結合であることを条件とする。

【0079】

【化37】



【0080】これらの式において、 R_6 、 R_7 、 R_8 および R_9 は独立に炭素数1~10のアルキル基または炭素

数2~10のアルケニル基を示し、これらの基中の任意の一つまたは相隣接しない二つ以上のメチレン基は酸素

原子によって置換されていてもよく、六員環Gおよび六員環Jはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレンまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し、六員環Iおよび六員環Lはトランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し、六員環Kはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、ピリミジン-2, 5-ジイルまたは側位の一つ以上の水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい1, 4-フェニレンを示し、Z₆は-C≡C-、-COO-、-CH₂CH₂-、-CH=CH-C≡C-または共有結合を示し、Z₇は-COO-または共有結合を示し、Z₈およびZ₁₀は独立に-COO-、-CH₂CH₂-または共有結合を示し、Z₉は-CH=CH-、-C≡C-、-COO-または共有結合を示し、hは0または1を示す。ただし、hが0である時はZ₉およびZ₁₀の少なくとも一方は共有結合であることを条件とする。本発明に用いられる一般式(2)の化合物として、好ましくは以下の化合物を挙げることができる。これらの式においてR₂は前記した意味をもつ。

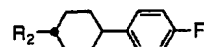
【0081】

【化38】

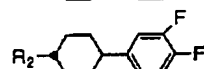
10

20

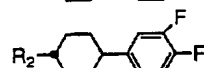
30



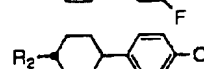
(2-1)



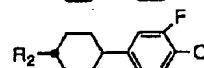
(2-2)



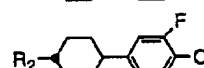
(2-3)



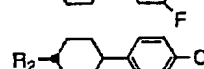
(2-4)



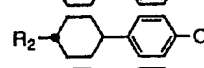
(2-5)



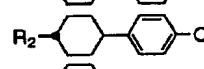
(2-6)



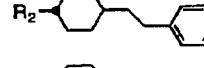
(2-7)



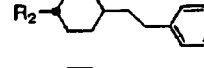
(2-8)



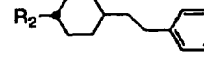
(2-9)



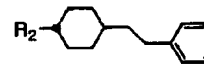
(2-10)



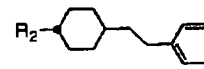
(2-11)



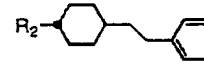
(2-12)



(2-13)



(2-14)



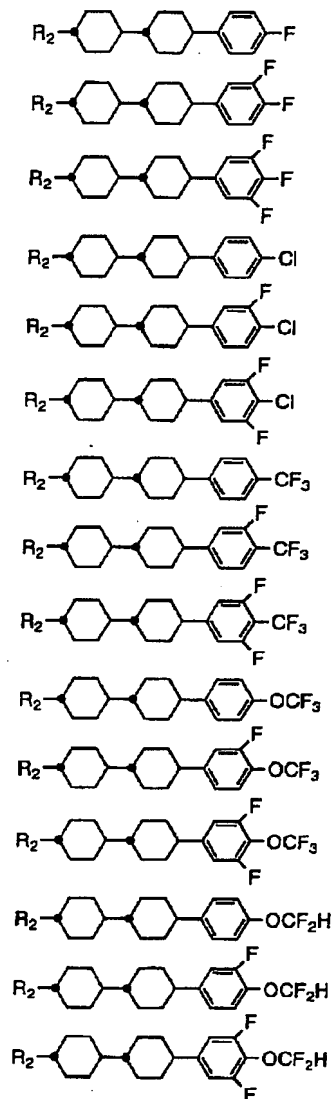
(2-15)

【0082】第二成分の式(3)で表される好ましい化合物としては、以下の化合物を挙げることができる。これらの式においてR₂は前記した意味をもつ。

【0083】

【化39】

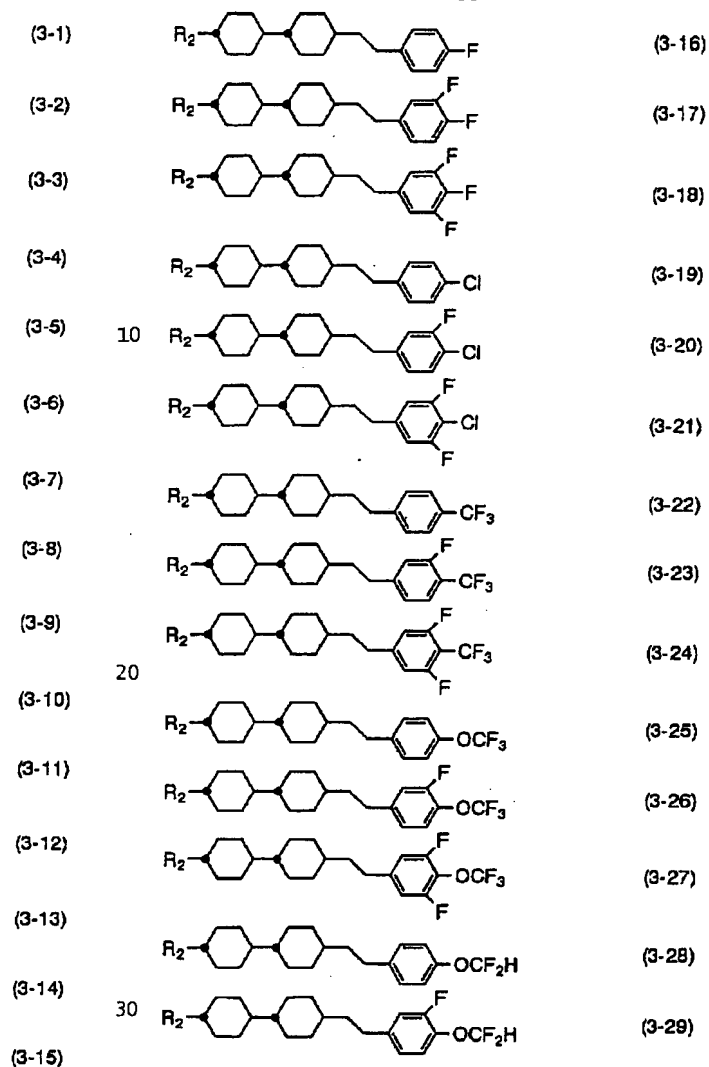
55



【0084】

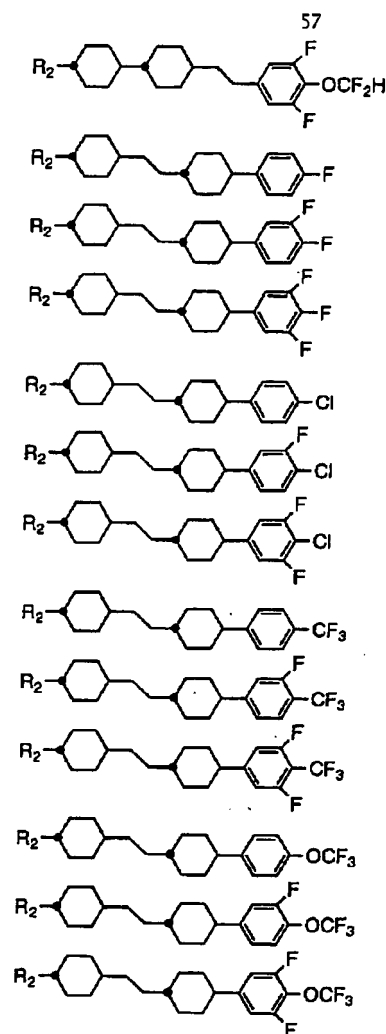
【化40】

56



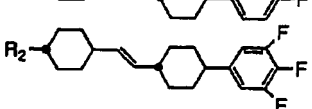
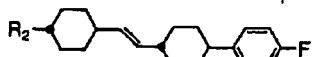
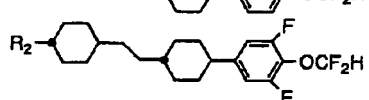
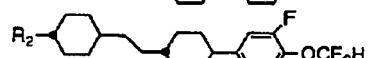
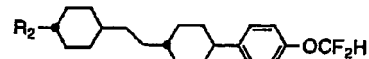
【0085】

【化41】



【0086】

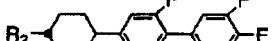
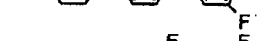
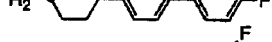
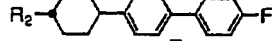
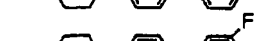
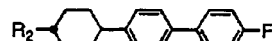
【化42】

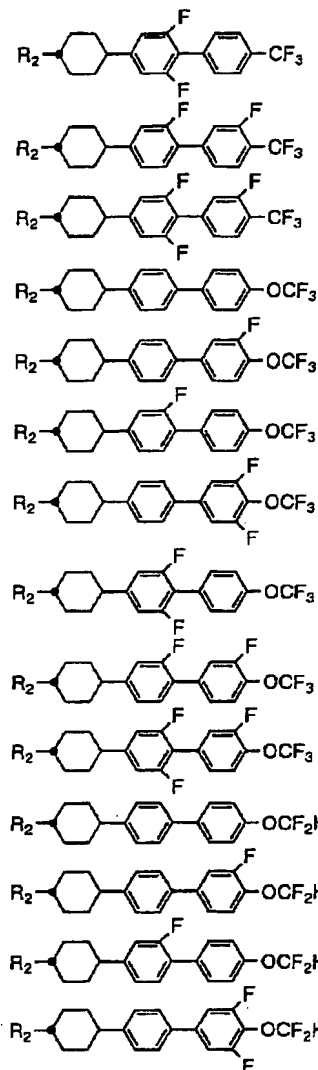


【0087】第二成分の式(4)で表される好ましい化合物としては、以下の化合物を挙げることができる。これらの式においてR₂は前記した意味をもつ。

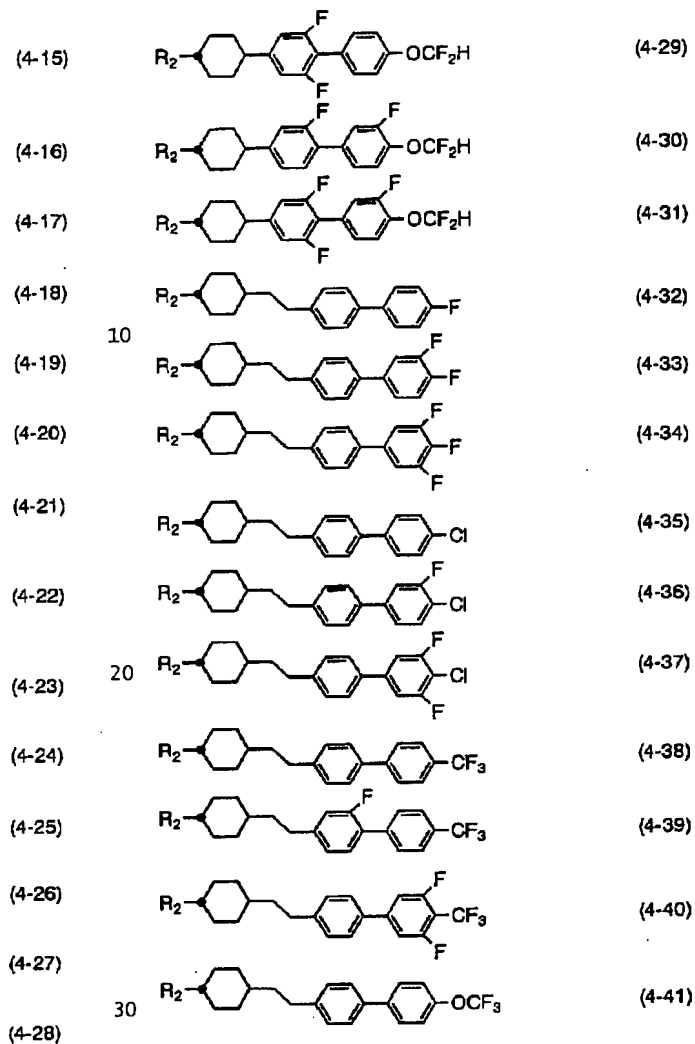
【0088】

【化43】

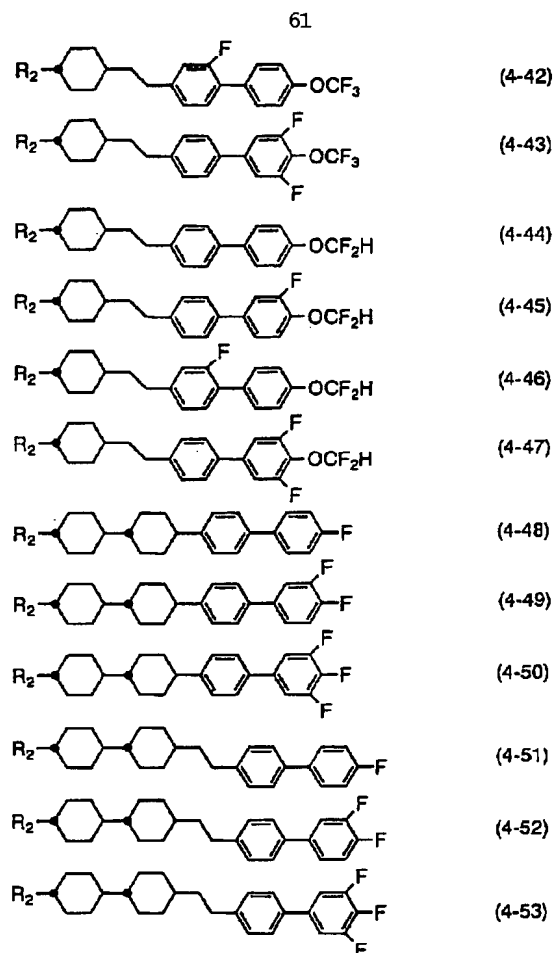




【0090】
【化45】



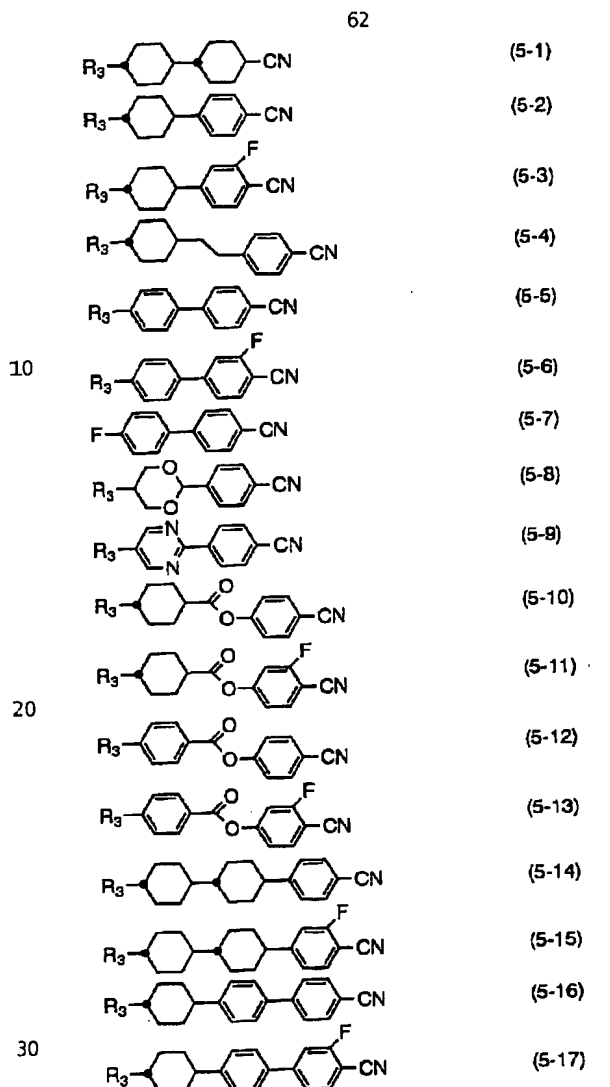
【0091】
【化46】



【0092】一般式(2)、(3)または(4)で表される化合物は、誘電率異方性値が正の化合物で、熱的安定性や化学的安定性に優れており、特に電圧保持率の高い、あるいは比抵抗値の大きいといった高信頼性が要求されるTFT用の液晶組成物を調製する場合に、好適に用いられる化合物である。第二成分として、一般式(2)、(3)または(4)で表される化合物を使用してTFT用の液晶組成物を調製する場合、第二成分としてのこれらの化合物の混合割合は、液晶組成物の全重量に対して10~97重量%が好ましく、より好ましい混合割合は40~95重量%である。また、その際には一般式(5)~(9)で表される化合物を一部含有しても良い。本発明の組成物はSTN表示方式、または通常のTN表示方式用の液晶組成物としても用いることができる。この場合にも第二成分として一般式(2)、(3)または(4)で表される化合物を使用することができる。本発明の組成物において、第二成分である一般式(5)~(7)で表される化合物として、好ましくは以下の化合物を挙げることができる。(R₁、R₂は前記と同一の意味を示す。)

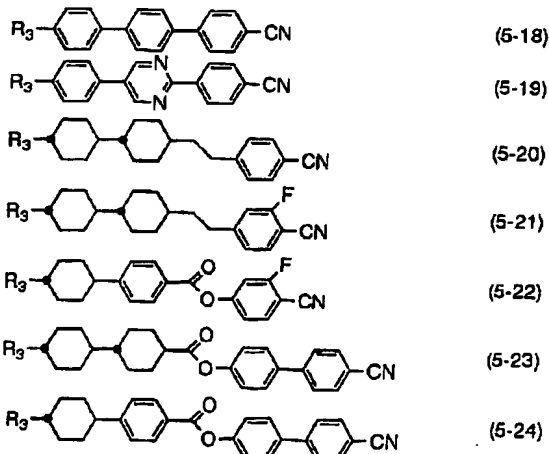
【0093】

【化47】



【0094】

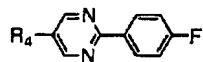
【化48】



【0095】

【化49】

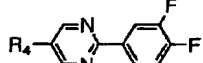
63



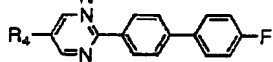
(6-1)

[0097]

[化51]



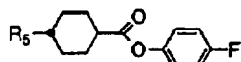
(6-2)



(6-3)

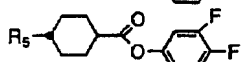
[0096]

[化50]

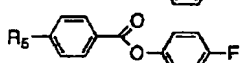


(7-1)

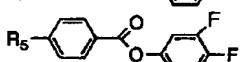
10



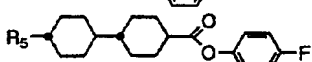
(7-2)



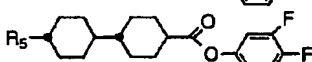
(7-3)



(7-4)

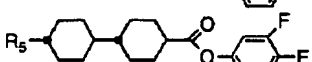


(7-5)

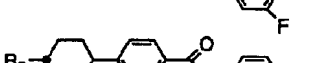


(7-6)

20



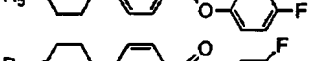
(7-7)



(7-8)



(7-9)

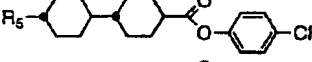


(7-10)

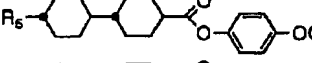


(7-11)

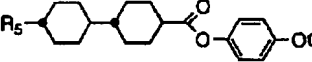
30



(7-12)



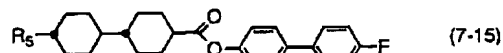
(7-13)



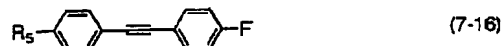
(7-14)

65

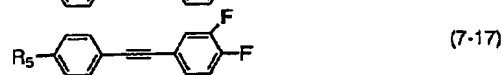
66



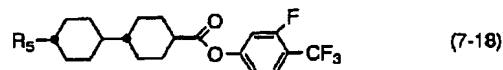
(7-15)



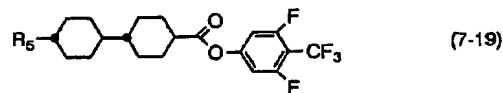
(7-16)



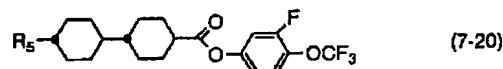
(7-17)



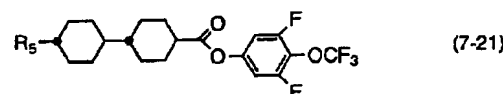
(7-18)



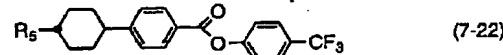
(7-19)



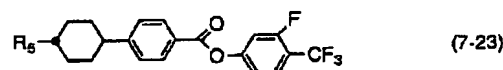
(7-20)



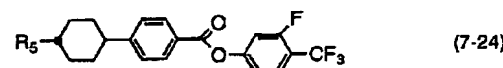
(7-21)



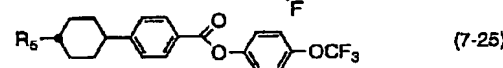
(7-22)



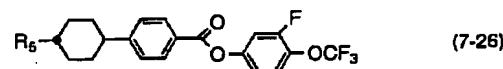
(7-23)



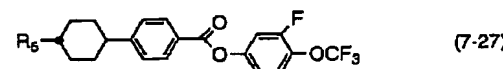
(7-24)



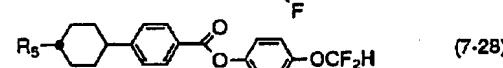
(7-25)



(7-26)



(7-27)



(7-28)

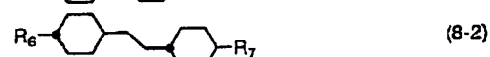
【0098】一般式(5)～(7)の化合物は誘電率異方性値が正でその値が大きく、特に得られる組成物のしきい値電圧を小さくする目的で使用される。また、組成物の粘度調整、屈折率異方性値の調整、透明点を高くする等のネマチックレンジを広げる目的にも使用される。さらに、V-T特性における急峻性を改良する目的にも使用される。本発明の組成物における一般式(8)および(9)の化合物として、好ましい化合物を以下に挙げる。(R₅～R₉は前記と同一の意味を示す。)

【0099】

【化52】



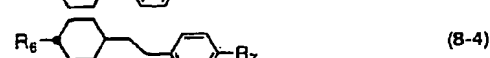
(8-1)



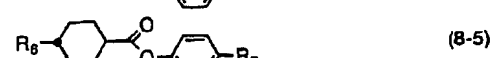
(8-2)



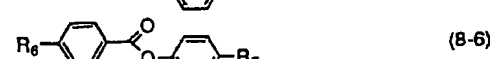
(8-3)



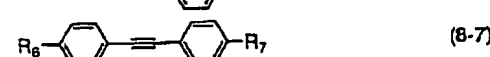
(8-4)



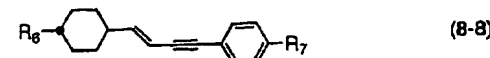
(8-5)



(8-6)



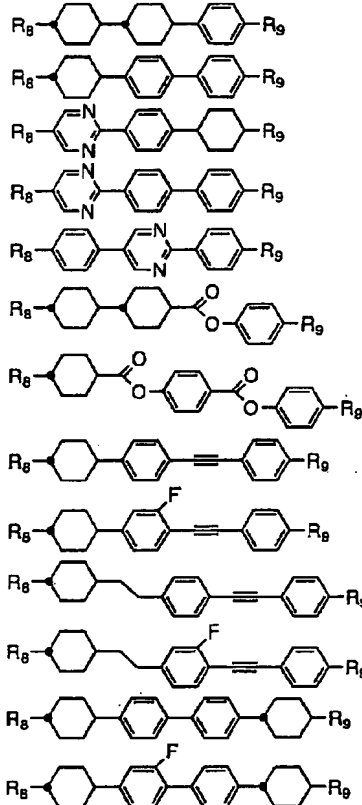
(8-7)



(8-8)

【0100】

【化53】



【0101】一般式(8)および(9)の化合物は、誘電率異方性値が負かまたは若干正である化合物である。一般式(8)の化合物は主として粘度低下または屈折率異方性値を調整する目的で使用される。また、一般式(9)の化合物は得られる組成物の透明点を高くする等のネマチックレンジを広げる目的で、または屈折率異方性値を調整するの目的で使用される。一般式(5)～(9)の化合物は、特にSTN表示方式およびTN表示方式用の液晶組成物を調製する場合には、不可欠な化

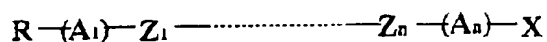
物である。一般式(5)～(9)の化合物の使用量は、通常のTN表示方式およびSTN表示方式用の液晶組成物を調製する場合には1～99重量%の範囲で任意に使用できるが、10～97重量%が好ましく、より好ましくは40～95重量%を混合する。また、その際には(2)～(4)の化合物を一部使用しても良い。本発明の液晶組成物は、それ自体慣用な方法で調製される。一般には、減圧下各成分を高い温度で互いに溶解させる方法がとられている。しかし、液晶を有機溶媒に溶かして混合したのち、減圧下に溶媒を留去することによって調製しても良い。また、本発明の液晶材料は適当な添加物によって改良がなされ最適化される。このような添加物は当業者によく知られており文献等に詳細に記載されている。通常、液晶のらせん構造を誘起して、必要なねじれ角を調整し、逆ねじれ(リバースツイスト)を防ぐためキラルドーパ剤(chiral dopants)などが添加される。

【0102】また、本発明の液晶組成物は、メロシアン系、スチリル系、アゾ系、アゾメチン系、アゾキシ系、キノフタロン系、アントラキノン系およびテトラジン系等の二色性色素を添加しゲストホスト(G/H)モード用の液晶組成物として使用できる。本発明の液晶組成物はまた、ネマチック液晶をマイクロカプセル化して作成したNCA Pや液晶中に三次元網目状高分子を作成したポリマーネットワーク液晶表示素子(PN LCD)に代表されるポリマー分散型液晶表示素子(PD LCD)用の液晶組成物としても使用できる。その他に複屈折制御(ECB)モードや動的散乱(DS)モード用の液晶組成物としても使用できる。この様に調製される、本発明の式(1)の化合物を含有する液晶組成物を後記の実施例に示すことができる。以下において本発明の液晶組成物を例示する場合、その成分化合物の表示は表1に示す表記例に従って表わす。

【0103】

【表1】

表1 記号を用いた化合物の表記方法



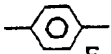
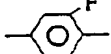
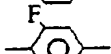
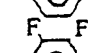
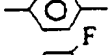
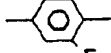


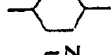
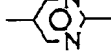
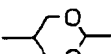
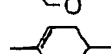
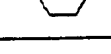

1) 左末端基	記号	3) 結合基	記号
$C_aH_{2a+1}-$	a —	$—CH_2CH_2—$	2
$C_aH_{2a+1}O-$	aO—	$—COO—$	E
$C_aH_{2a+1}OC_bH_{2b}-$	aOb —	$—C\equiv C—$	T
$CH_2=CHC_aH_{2a}-$	Va —	$—CH=CH—$	V
$C_aH_{2a+1}CH=CHC_bH_{2b}-$	aVb —	$—CF_2O—$	CF2O
$C_aH_{2a+1}CH-CHC_bH_{2b}CH-CHC_dH_{2d}-$	aVbVc —		
2) 環構造 -(An)-	記号	4) 右末端基	記号
	B	$-F$	$—F$
	B(F)	$-Cl$	$—CL$
	B(2F)	$-CN$	$—C$
	B(2F,3F)	$-CF_3$	$—CF_3$
	B(F,F)	$-OCF_3$	$—OCF_3$
	B(F,F)	$-OCF_2H$	$—OCF_2H$
	B(F,F)	$-C_wH_{2w+1}$	$—w$
	B(F,F)	$-OC_wH_{2w+1}$	$—Ow$
	B(F,F)	$-COOCH_3$	$—EMe$
	B(CL)		
	H		
	Py		
	D		
	Ch		

表1 (続き)

5) 表記例

例1

$$3-H_2B(F,F)B(F)-F$$

例2

$$3-HB(F)TB-2$$

例3

$$1V2-BEB(F,F)-C$$

【0105】

【実施例】以下、実施例により本発明の化合物ならびに組成物についてさらに詳細に説明する。なお、各実施例においてCは結晶を、Nはネマチック相を、Iは等方性液相を示し、相転移温度の単位は全てセルシウス温度（℃）である。

实施例 1

4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン(1式においてR₁がプロピル基、Y₁がメチル基、H₁、H₂、H₃、H₄、H₅、H₆、H₇、H₈、H₉、H₁₁、H₁₂が水素原子で、H₁₀がフッ素原子である化合物)

2-フルオロ-4-ヨードトルエン (0.05 mol)、3-メチル-3-ヒドロキシ-1-ブチン (0.06 mol)、テトラキス(トリフェニルホスホニウム)パラジウム (0) 0.35 g、ヨウ化銅 50 mg、ジエチルアミン 100 ml の混合物を 5.5 時間還流した。減圧下にジエチルアミンを留去し、残留物をジエチルエーテルで抽出し抽出液を水洗した。この抽出液からジエチルエーテルを留去した後、残留物をカラムクロマトグラフィー (溶出液: ヘプタン-酢酸エチル) で精製し、無色油状の 2-フルオロ-4-(3-メチル-3-ヒドロキシ-1-ブチニル)トルエン (0.035 mol) を得た。

【0106】2-フルオロ-4-(3-メチル-3-ヒドロキシ-1-ブチニル)トルエン(0.035mol)、水酸化ナトリウム(0.07mol)、およびベンゼン40mlの混合物を3時間加熱還流した。放冷後、水40mlを加え十分に攪拌した。不溶物をセライトを用いて濾別除去し、残留物を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。乾燥剤を分離した溶液から減圧下に注意深く溶媒を留去し、残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出液:ヘキサン)、次いで減圧蒸留して

(沸点100℃、20mmHg)精製し、無色油状の2-フルオロ-4-エチニルトルエン(0.014mol)を得た。2-フルオロ-4-エチニルトルエン(0.014mol)、特開平2-83340号の方法に準じて製造した4-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)-1-プロモベンゼン(0.014mol)、ヨウ化銅(5mmol)、ビス(トリフェニルホスフィノ)パラジウムジクロリド(2mmol)、およびトリエチルアミン30mlの混合物を11時間加熱還流した。放冷後、トルエン50mlと水50mlを加えよく攪拌し、静置後分離した有機相を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。乾燥剤を分離後、減圧下に溶媒を留去し、残留物をカラムクロマトグラフィー(溶出液:ヘプタン/トルエン混合溶媒(4/1))にて精製し、ついでヘプタン/トルエン混合溶媒(4/1)から再結晶により、白色の針状結晶の標題化合物(0.010mol)を得た。この物は液晶性を示しその相転移点は、C-N点:160.1℃、N-I点:210.0℃であった。また、そのスペクトルデータはよくその構造を支持した。

 $^1\text{H-NMR}$: δ (ppm): 7.55–7.11 (1H, m), 2.61 (2H, t), 2.29 (3H, d), 1.65 (2H, q), 0.94 (3H, t).

【0107】实施例2

実施例 1 に順じ次に示す (1) 式の化合物が製造される。

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-シアノフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)ベンゼン

4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-トリフルオロメトキシフェ

ニル) エチニル) ベンゼン

4-(2-(2-クロロ-4-プロピルフェニル) エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル) エチニル) ベンゼン

4-(2-(2-フルオロ-4-ベンチルフェニル) エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル) エチニル) ベンゼン

4-(2-(2,3-ジフルオロ-4-プロポキシフェニル) エチニル)-1-(2-(4-ベンチルフェニル) *

4-(4-プロピルシクロヘキシル) ベンゾニトリル 24%

4-(4-ベンチルシクロヘキシル) ベンゾニトリル 36%

4-(4-ヘプチルシクロヘキシル) ベンゾニトリル 25%

4-(4-プロピルフェニル) ベンゾニトリル 15%

からなる液晶組成物B1を調製した。組成物B1の透明点は71.7℃、誘電率異方性値は11.0、屈折率異方性値は0.137、20℃における粘度は26.7 mPa・s、この物のセル厚8.7 μmの液晶セルにおけるしきい値電圧は1.78 Vであった。組成物B1の95重量部に実施例1で得た本発明の化合物4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル) エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル) エチニル) ベンゼンを5重量部を混合して、液晶組成物A1を調製した。この組成物の透明点は76.6℃、誘電率異方性値は11.0、屈折率異方性値は0.153、20℃における粘度は25.4 mPa・s、セル厚8.9 μmの液晶セルでのしきい値電圧は1.79 Vであった。また、この組成物を-20℃のフリーザーに60日間放置したが、結晶の析出は認められなかった。なお、この混合物から式(1)の化合物の特性値を外挿すると、誘電率異方性値は11.0、屈折率異方性値は0.457となる。 ※30

3-B(2F)TBTB-5	4.0%
3-B(2F)TBTB-C	6.0%
3-HB-C	30.0%
5-HB-C	10.0%
2-BTB-1	10.0%
3-HH-4	10.0%
3-HHB-1	10.0%
3-HHB-3	11.0%
3-H2BTB-2	3.0%
3-H2BTB-3	3.0%
3-H2BTB-4	3.0%

【0110】実施例6

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき★

1-B(2F)TB(F)TB-3	4.0%
5-B(F)TBTB-3	6.0%
3O1-BEB(F)-C	12.0%
1V2-HB-C	7.0%
2-BTB-O1	2.8%
3-BTB-O1	2.8%
4-BTB-O1	2.8%

*ル) エチニル) ベンゼン

2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル) エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル) エチニル) ベンゼン

C-N点: 156.4℃、N-I点: 187.1℃

2,3-ジフルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-プロピルフェニル) エチニル)-1-(2-(4-メチルフェニル) エチニル) ベンゼン

【0108】実施例3

※【0109】実施例4

組成物B1の90重量部に実施例2で得た本発明の化合物2-フルオロ-4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル) エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル) エチニル) ベンゼンを10重量部混合し、液晶組成物A2を調製した。この物の透明点は80.1℃、誘電率異方性値は10.8、屈折率異方性値は0.167、20℃における粘度は25.9 mPa・s、セル厚8.9 μmの液晶セルでのしきい値電圧は1.82 Vであった。また、この組成物を-20℃のフリーザーに60日間放置したが結晶の析出は認められなかった。この混合物から式(1)の化合物の特性値を外挿すると、誘電率異方性値は9.0、屈折率異方性値は0.437となる。

実施例5

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき

★る。

75

76

4-BTB-O2	2.8%
5-BTB-O1	2.8%
2-BTB-1	10.0%
2-BTB-3	9.0%
3-HH-4	4.0%
3-H2BTB-2	4.0%
3-H2BTB-3	4.0%
3-H2BTB-4	4.0%
2-H2BTB-4	4.0%
3-HB(F)TB-2	6.0%
3-HB(F)TB-3	7.0%
3-HB(F)TB-4	5.0%

実施例7

*る。

式(I)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき*

1-B(2F)TB(F)TB-3	3.0%
3-B(2F)TBTB-5	6.0%
5-B(F)TBTB-3	6.0%
3-B(2F)TBTB-C	6.0%
V2-HB-C	8.0%
1V2-HB-C	8.0%
1V2-BEB(F,F)-C	8.0%
2-BTB-1	9.0%
3-BTB-1	8.0%
2-BTB-3	8.0%
3-HH-4	8.0%
2-HH-5	6.0%
1O1-HH-5	5.0%
3-HH-EMe	3.0%
3-H2BTB-2	4.0%
3-H2BTB-3	4.0%

【0111】実施例8

※る。

式(I)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき※

3-B(2F)TBTB-5	6.0%
5-B(F)TBTB-3	6.0%
3-B(2F)TBTB-OCF3	3.0%
2-BB-C	8.0%
4-BB-C	6.0%
2-HB-C	8.0%
3-HB-C	11.0%
1O1-HB-C	4.0%
3-HHB-F	5.0%
2-HHB-C	4.0%
3-HHB-C	6.0%
5-PyB-F	6.0%
3-PyBB-F	6.0%
2-HHB-1	6.0%
3-HHB-3	10.0%
3-HHB-O1	5.0%

実施例9

る。

式(I)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき 50

3-HHEBB-C	3.0%
3-HBEBB-C	3.0%
5-HBEBB-C	3.0%
3-PyB(F)-F	6.0%
3-HEB-O4	6.0%
4-HEB-O2	6.0%
5-HEB-O1	7.0%
3-HEB-O2	7.0%
5-HEB-1	4.0%
4-HEB-4	5.0%
1O-BEB-2	3.0%
3-HHB-1	6.0%

【0113】実施例12

*る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき*

1-B(2F)TBTB-3	3.0%
3-B(2F)TBTB-5	6.0%
5-B(F)TBTB-3	5.0%
7-HB(F,F)-F	4.0%
3-H2HB(F,F)-F	10.0%
4-H2HB(F,F)-F	10.0%
3-HHB(F,F)-F	10.0%
4-HHB(F,F)-F	10.0%
3-HH2B(F,F)-F	10.0%
5-HH2B(F,F)-F	10.0%
3-HBB(F,F)-F	12.0%
5-HBB(F,F)-F	6.0%
3-HHBB(F,F)-F	2.0%
2-HH2BB(F,F)-F	2.0%

実施例13

※る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき※30

1-B(2F)TB(F)TB-3	3.0%
5-B(F)TBTB-3	5.0%
7-HB(F)-F	13.0%
2-HHB(F)-F	12.0%
3-HHB(F)-F	12.0%
5-HHB(F)-F	12.0%
2-H2HB(F)-F	6.0%
3-H2HB(F)-F	3.0%
5-H2HB(F)-F	6.0%
2-HBB(F)-F	7.0%
3-HBB(F)-F	7.0%
5-HBB(F)-F	14.0%

【0114】実施例14

★る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき★

3-B(2F)TBTB-5	5.0%
3-B(2F)TBTB-OCF3	5.0%
5-HB-CL	6.0%
7-HB(F,F)-F	8.0%
2-HBB(F)-F	7.0%
3-HBB(F)-F	7.0%

81

82

5-HBB (F) -F	14.0%
5-H2BB (F) -F	5.0%
2-HHB-CL	5.0%
4-HHB-CL	8.0%
5-HHB-CL	5.0%
3-HBB (F, F) -F	11.0%
5-HBB (F, F) -F	6.0%
3-HB (F) VB-2	4.0%
3-HB (F) VB-3	4.0%

実施例15

10*る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき*

1-B (2F) TB (F) TB-3	3.0%
3-B (2F) TBTB-5	4.0%
5-B (F) TBTB-3	5.0%
5-H2B (F) -F	5.0%
2-HHB (F) -F	8.0%
3-HHB (F) -F	8.0%
5-HHB (F) -F	8.0%
3-HHB (F, F) -F	7.0%
5-HHB (F, F) -F	7.0%
3-H2HB (F, F) -F	5.0%
4-H2HB (F, F) -F	5.0%
5-H2HB (F, F) -F	5.0%
3-HH2B (F, F) -F	10.0%
5-HH2B (F, F) -F	6.0%
2-HBB-F	5.0%
5-HBB-F	3.0%
3-HHB-1	6.0%

【0115】実施例16

※る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき※30

1-B (2F) TB (F) TB-3	3.0%
3-B (CL) TBTB-3	4.0%
3O-B (2F, 3F) TBTB-3	4.0%
2-HHB (F) -F	8.0%
3-HHB (F) -F	8.0%
5-HHB (F) -F	8.0%
2-HBB (F) -F	4.0%
3-HBB (F) -F	4.0%
5-HBB (F) -F	8.0%
5-HHB (F, F) -F	6.0%
3-HH2B (F, F) -F	8.0%
5-HH2B (F, F) -F	8.0%
5-H2BB (F, F) -F	5.0%
3-HBEB (F, F) -F	3.0%
3-HHEB (F, F) -F	6.0%
5-HHEB (F, F) -F	3.0%
5-HHEBB-F	2.0%
3-HB-O2	5.0%
1O1-HBBH-3	3.0%

実施例17

50 式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき

る。

3-B (2F) TBTB-OCF ₃	6. 0%
3-B (2F) TB (2F, 3F) TB-1	4. 0%
7-HB-F	7. 0%
3-HHB-OCF ₃	10. 0%
5-HHB-OCF ₃	8. 0%
3-H ₂ HB-OCF ₃	5. 0%
5-H ₂ HB-OCF ₃	5. 0%
2-HHB (F) -F	4. 0%
3-HHB (F) -F	4. 0%
5-HHB (F) -F	4. 0%
3-H ₂ HB (F, F) -F	5. 0%
5-H ₂ HB (F, F) -F	5. 0%
3-HHB (F, F) -F	8. 0%
3-HH ₂ B (F, F) -F	8. 0%
4-HH ₂ B (F, F) -F	7. 0%
5-HB (F) BH-3	4. 0%

【0116】実施例18

*る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき*

3-B (CL) TBTB-3	5. 0%
3O-B (2F, 3F) TBTB-3	5. 0%
V-HB-C	10. 0%
1V-HB-C	8. 0%
5-BB-C	7. 0%
2-HB (F) -C	5. 0%
4-BB-3	3. 0%
3-H ₂ B-O ₂	5. 0%
5-H ₂ B-O ₂	6. 0%
3-BEB-C	5. 0%
5-HEB-O ₁	4. 0%
5-HEB-O ₃	4. 0%
5-BBB-C	3. 0%
4-BP _y B-C	8. 0%
4-BP _y B-5	8. 0%
5-HB ₂ B-4	3. 0%
5-HBB ₂ B-3	3. 0%
1V-HH-1O ₁	5. 0%
1V ₂ -HBB-3	3. 0%

実施例19

※る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき※40

3O-B (2F, 3F) TBTB-3	5. 0%
3-B (2F) TB (2F, 3F) TB-1	5. 0%
V ₂ -HB-C	9. 0%
1V ₂ -HB-C	9. 0%
3-HB-C	14. 0%
1O ₁ -HB-C	8. 0%
2O ₁ -HB-C	4. 0%
2-HHB-C	5. 0%
3-HHB-C	5. 0%
V ₂ -HH-3	4. 0%

77

78

1-B (2F) TBTB-3	3. 0%
3-B (2F) TBTB-5	5. 0%
2-HB (F) -C	12. 0%
2-HHB (F) -C	5. 0%
3-HHB (F) -C	5. 0%
3-HB-O2	6. 0%
2-BTB-O1	6. 8%
3-BTB-O1	6. 8%
4-BTB-O1	6. 8%
4-BTB-O2	6. 8%
5-BTB-O1	6. 8%
3-HB (F) TB-2	6. 0%
3-HB (F) TB-3	6. 0%
3-HB (F) TB-4	6. 0%
2-PyBH-3	4. 0%
3-PyBH-3	4. 0%
3-PyBB-2	4. 0%

【0112】実施例10

*る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき*

3-B (2F) TBTB-5	5. 0%
5-B (F) TBTB-3	5. 0%
5-BB-C	7. 0%
3-HHB-F	4. 0%
3-HBEB-F	2. 0%
5-HHEB-F	3. 0%
3-HB-O2	10. 0%
3-HB-O4	12. 0%
3-PyB-4	3. 1%
4-PyB-4	3. 1%
6-PyB-4	3. 2%
3-PyB-5	3. 2%
4-PyB-5	3. 2%
6-PyB-5	3. 2%
6-PyB-O5	4. 0%
6-PyB-O6	4. 0%
6-PyB-O7	4. 0%
6-PyB-O8	4. 0%
2-HHB-1	3. 0%
3-HHB-1	8. 0%
3-HEBEB-1	3. 0%
3-HEBEB-F	3. 0%

実施例11

*る。

式(1)の化合物を用いて以下の液晶組成物を調製でき*

1-B (2F) TBTB-3	2. 0%
1-B (2F) TB (F) TB-3	3. 0%
3-DB-C	10. 0%
4-DB-C	10. 0%
2-BEB-C	7. 0%
3-BEB-C	4. 0%
5-HEB-F	5. 0%

85

V-HH-4
 101-HH-5
 2-BTB-O1
 V-HHB-1
 V-HBB-2
 1V2-HBB-2

【0117】

【発明の効果】本発明の化合物は、特に大きな屈折率異方性値と低い粘度を有し、他の液晶性化合物との良好な相溶解性を持つ、新規な液晶性化合物である。さらに該新規液晶性化合物を使用して構成した新規な液晶組成物は大きい屈折率異方性値と比較的小さい粘度を示す。本発明の化合物は、従来から知られた構造が類似の化合物に比べて、他の液晶との相溶性に優れており、安定なネマチック液晶混合物をつくるのに有用である。すなわち、特開平2-83340号に開示のある、4-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4

86

6.0%
 5.0%
 7.0%
 5.0%
 5.0%
 4.0%

10 -プロピルフェニル)エチニル)ベンゼン、およびEP581272号に開示のある、4-(2-(4-ベンチルフェニル)エチニル)-2-フルオロ-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼンが、それぞれの15重量%を前記の実施例で用いた液晶組成物B1に混合した場合、それぞれ、30日および1日で相分離(スメクチック相の析出)が生じたのに比べ、本発明の4-(2-(3-フルオロ-4-メチルフェニル)エチニル)-1-(2-(4-プロピルフェニル)エチニル)ベンゼンはこれを同じ液晶混合物に添加しても60日間はネマチック相が保持された。